

### 3 Intermoleculaire aantrekkingskrachten en aggregatietoestanden van de materie



In hoofdstuk 2 werden chemische bindingen gedefinieerd als de krachten die gelijke of verschillende atomen IN een molecule bijhouden en deze chemische bindingen werden respectievelijk zuivere of polaire covalente bindingen genoemd. Deze covalente bindingen vallen onder de term : krachten werkzaam binnenin één molecule waarbij elektronen gedeeld worden tussen de atomen. Door deze krachten werkzaam tussen de atomen in een molecule, verkrijgt de molecule een lagere potentiële energie en verhoogde stabiliteit in vergelijking met de individuele atomen (zie figuur 2.4B) en kan de molecule functioneren als een stabiele eenheid..

Over krachten ... herhaling

H2

Wanneer we de atomen die samen een stabiele molecule vormen, willen uit elkaar halen (en dus de krachten (i.e. de chemische bindingen) die de atomen samenhouden in de molecule willen verbreken), dient energie te worden toegevoegd (stijging in potentiële energie: zie ook intermezzo energie (bijlage 3) en hoofdstuk 1). Dit proces waarin de covalente bindingen tussen de atomen in de molecule dienen 'verbroken' te worden wordt nader bestudeerd in hoofdstuk 5 (chemische reacties).

H5

Over krachten ... NIEUW!

In dit hoofdstuk (en deels ook in hoofdstuk 4) behandelen we echter eerst de aantrekkingskrachten die optreden **TUSSEN moleculen** via wat 'intermoleculaire krachten of zwakke krachten' worden genoemd.

H3

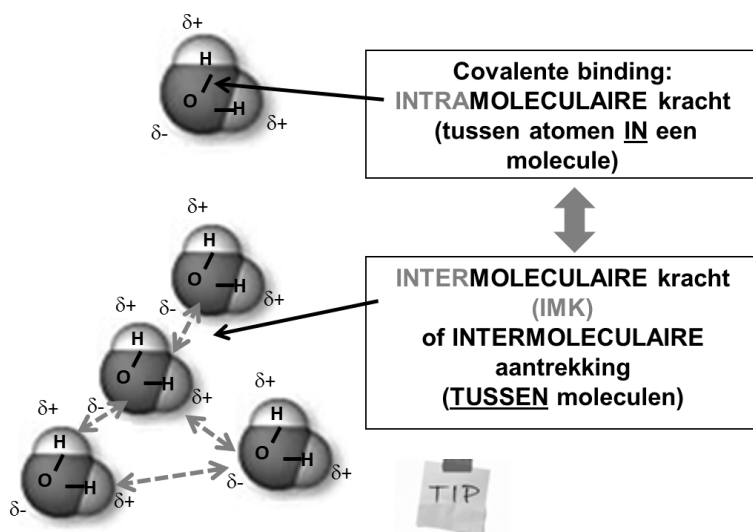
Naargelang de omstandigheden kunnen moleculen elkaar meer of minder aantrekken, maar hun stabiele vorm blijft behouden. De verschillende mate van aantrekking tussen moleculen levert **de verschillende aggregatietoestanden** (gas, vloeistof, vaste stof) en is dus geassocieerd met processen als smelten, verdampen en koken (ijs smelt, water kookt).

Wanneer je echter een suikerklontje **oplost** in je koffie of thee, zet je ook veranderingen in intermoleculaire aantrekkingskrachten in gang: dit is onderwerp van hoofdstuk 4.

H4

Hoofdstuk 3 omvat dus: de verschillende manieren waarop moleculen elkaar aantrekken (§3.2.1-3.2.4), het belang van IMK voor biologische structuren en processen (§3.2.5) en de gevolgen van IMK voor macroscopisch waarneembare eigenschappen van moleculen en veranderingen hierin (§3.3).

#### 3.1 MOLECULEN KUNNEN ELKAAR AANTREKKEN



Figuur 3.1: Verschil tussen intramoleculaire krachten (= covalente bindingen die werkzaam zijn tussen de atomen in één molecule), en intermoleculaire krachten (IMK) die tussen neutrale (ongeladen) moleculen onderling kunnen optreden.

Dit is getoond voor watermoleculen ( $H_2O$ ). Bij het verbreken van de intramoleculaire krachten (chemische bindingen) gaat de watermolecule verloren. Na het verhinderen van de IMK tussen watermoleculen blijven de watermoleculen intact.

Moleculen (identieke of verschillende) kunnen **elkaar aantrekken** wanneer ze elkaar voldoende naderen. Deze aantrekkingskrachten TUSSEN stabiele moleculen worden INTERmoleculaire krachten (afgekort **IMK, IMKs**) of **intermoleculaire aantrekkingen** genoemd.



*De Nederlandse onderzoeker Johannes Diderik van der Waals postuleerde als eerste in 1873 het bestaan van de zwakke krachten of aantrekkingskrachten tussen moleculen vandaar dat deze vaak naar hem genoemd worden: **van der Waals krachten**. Hij ontving de Nobelprijs in Fysica in 1910 ([http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1910/waals-facts.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1910/waals-facts.html)).*

Intermoleculaire aantrekking ontstaat steeds door de **elektrostatische aantrekking** tussen een positief geladen deel van één molecule en een negatief deel van een tweede molecule (Figuur 3.1, onder).

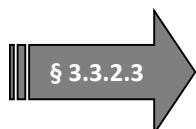
Het optreden van intermoleculaire aantrekkingskrachten van verschillende sterkte manifesteert zich rondom ons.

Hieronder volgen een aantal **voorbeelden** waarmee ook vooruitgeblikt wordt naar de inhoud van het hoofdstuk:

- Tabel 3.1A toont de dichtheid (massa per volume-eenheid) voor water in vloeibare vorm en in gasvorm (verschillende aggregatietoestanden). Hieruit blijkt dat de dichtheid van de vloeibare fase heel wat groter is dan van de gasfase.

Vloeibaar (25°C, 1 atm)	0,9971
Gas (waterdamp, 400°C, 1atm)	3,26 x 10 <sup>-4</sup>

Men kan hieruit besluiten dat in vloeibare fase de watermoleculen veel dichter bij elkaar zitten dan in de gasfase en dat er bijgevolg krachten werkzaam zijn die de moleculen bij elkaar houden in vloeibaar water. Dit zijn de IMKs tussen de watermoleculen zoals (deels) getoond in Figuur 3.1.



*Vooruitblik: De mate waarin intermoleculaire krachten optreden, bepaalt de aggregatietoestand van een chemische verbinding bij een bepaalde temperatuur.*

- Tabel 3.1B toont dat energie vereist is om water te verdampen of te koken (overgang vloeibaar naar gas, fysische verandering, Hoofdstuk 1) Deze energie is nodig om de IMKs die zorgen voor de aantrekking tussen de watermoleculen in vloeibare vorm te overwinnen (zie § 3.3.4).

	<i>energiekost</i>
1 mol vloeibaar H <sub>2</sub> O → 1 mol gasvormig H <sub>2</sub> O	40,67 kJ
1 mol vloeibaar HCl → 1 mol gasvormig HCl	16 kJ

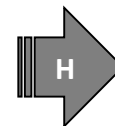
- Tabel 3.1B toont ook dat het verdampen van 1 mol water meer energie kost dan het verdampen van 1 mol waterstofchloride (HCl). Dit wijst erop dat de sterkte van intermoleculaire krachten verschilt van molecule tot molecule en dat bijgevolg de aard van de molecule een rol speelt. Vooral de **polariteit** van de betrokken moleculen zal de sterkte van intermoleculaire attractie bepalen (zie §3.2).
- Uit hoofdstuk 2 is gekend: H<sub>2</sub>O is een polaire molecule, H<sub>2</sub> is een apolaire molecule. Tabel 3.1C

	<i>Kookpunt bij 1 atm</i>
H <sub>2</sub> O	100°C
H <sub>2</sub>	-252°C

toont de kookpunten voor deze twee verbindingen. Het **kookpunt** is een temperatuur en dus (zie bijlage 3) een maat voor de kinetische energie (bewegingsenergie) van de moleculen. Bij het kookpunt moeten de moleculen voldoende

bewegingsenergie krijgen om hun onderlinge IMK te overwinnen (zie § 3.3.3.2). *Vooruitblik: Het grote verschil in kookpunt voor deze twee verbindingen (water en  $H_2$ ) met een sterk verschillend polair karakter suggereert opnieuw een verschillende sterkte van de 'te overwinnen' IMK op basis van mate van polariteit (zie verder §3.2.5).*

- Tafelsuiker lost makkelijk op in water. In § 3.2.4 en hoofdstuk 4 leren we dat dit gebaseerd is op IMK tussen de suiker- en watermoleculen. IMKs zijn belangrijk zijn in het begrijpen van de oplosbaarheid. Dit gegeven illustreert ook dat intermoleculaire krachten dus niet enkel optreden tussen identieke moleculen, maar ook tussen verschillende moleculen.



#### SAMENVATTING & VOORUITBLIK:

**Intermoleculaire krachten (IMK, niet-covalente krachten) zijn zwakke elektrostatische aantrekkingskrachten tussen moleculen.**



IMK bepalen fysische eigenschappen van materie zoals de aggregatietoestand bij bepaalde temperatuur, het kookpunt en smeltpunt, oplosbaarheid..

IMKs verschillen dus duidelijk van de covalente bindingen in de molecule: want er worden geen elektronen gedeeld (zie figuur 3.1). Intermoleculaire krachten zijn hierdoor heel wat zwakker dan covalente bindingen. IMKs worden dan ook met de termen **niet-covalente** of **ZWAKKE krachten** aangeduid.

*Bijv.  $H_2O$  (vl)  $\rightarrow$   $H_2O$  (g) gaat reeds door bij  $100^\circ C$  maar de splitsing van de covalente bindingen in  $H_2O$  lukt pas bij  $2000^\circ C$*

## 3.2 VERSCHILLENDE TYPES INTERMOLECULAIRE AANTREKKINGSKRACHTEN

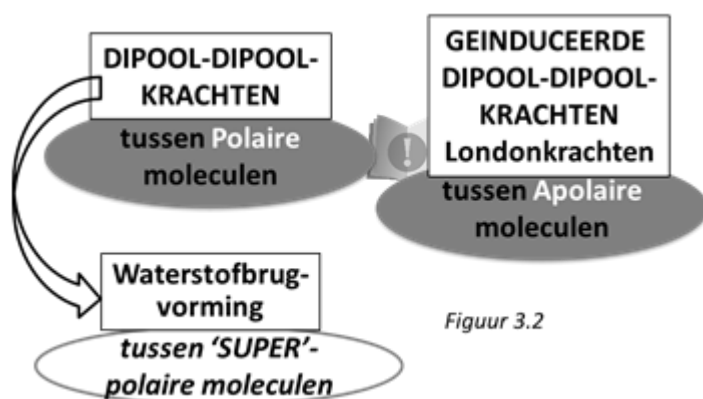
Men onderscheidt<sup>25</sup> **drie types** intermoleculaire attracties (IMK) tussen neutrale (ongeladen) moleculen (zie Figuur 3.2). Het type IMK dat optreedt hangt sterk samen met **het polair karakter** van de betrokken moleculen. **Londonkrachten** zijn het enige type IMK mogelijk tussen **apolaire moleculen** (§3.2.2). **Dipool-dipoolkrachten** en **waterstofbruggen** treden enkel op tussen **polaire moleculen** (§3.2.1). Polaire moleculen gebruiken dipool-dipoolkrachten samen met Londonkrachten als IMK (additieve IMK's, zie § 3.2.2). Waterstofbrugvorming is een sterke dipool-dipoolkracht met bijzondere 'trekjes' die optreedt tussen moleculen die uitzonderlijk ('super') polair zijn (§3.2.3).



Om eigenschappen van chemische verbindingen rondom ons te begrijpen of te kunnen voorspellen (zoals aggregatietoestand bij een bepaalde temperatuur, verdampingswarmte, kookpunt, oplosbaarheid in een bepaald oplosmiddel, ... zie § 3.3, hoofdstuk 4) is niet enkel van belang het type van IMK te kennen maar ook de sterkte van de IMK tussen de betrokken moleculen.

We zullen de **sterkte van de verschillende types intermoleculaire aantrekkingskrachten** relatief uitdrukken: d.w.z. t.o.v. van elkaar en t.o.v. de sterkte van covalente bindingen.

<sup>25</sup> De gebruikte indeling in dipool-dipoolkrachten en Londonkrachten volgt: IUPAC Gold book 2014 doi:10.1351/goldbook.V06597). De IUPAC voorschriften onderscheiden eveneens dipool-geïnduceerde dipoolkrachten of Debye-krachten) die in §3.2.4 aan bod komen.



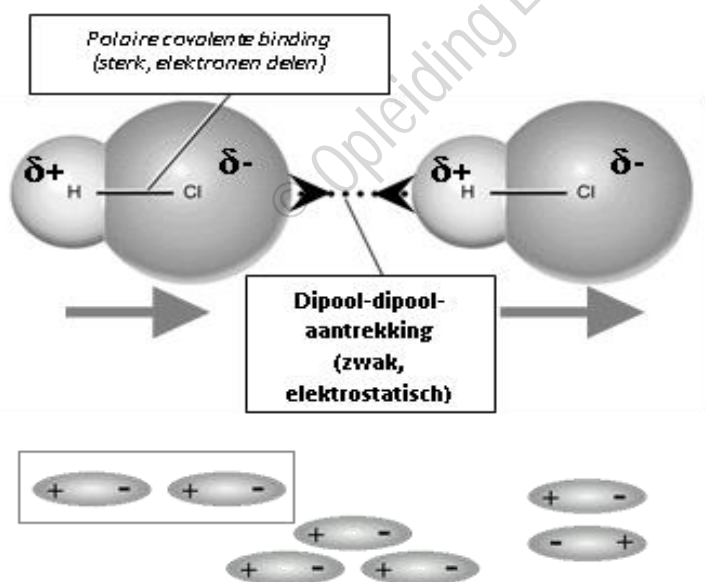
Figuur 3.2

### 3.2.1 Dipool-dipoolkrachten: IMK tussen polaire moleculen

Polaire moleculen hebben een nettodipoolmoment  $\mu_{\text{netto}} > 0$ . Eén zijde van polaire moleculen draagt permanent een partieel positieve lading ( $\delta^+$ ) en de tegenliggende zijde een partieel negatieve lading ( $\delta^-$ ). Bij de bepaling van het netto-dipoolmoment en partiële ladingen hou je rekening met de grootte, richting en relatieve orientatie van de bindingsdipoolmomenten van de verschillende covalente bindingen (Herhaling hoofdstuk 2).

Polaire moleculen kunnen met hun partieel negatief geladen zijde ( $\delta^-$ ) een **elektrostatische aantrekking** uitoefenen op de partieel positief geladen zijde ( $\delta^+$ ) van een naburige polaire molecule (Figuur 3.3).

**Deze IMK noemt: dipool-dipoolkracht (dipool-dipoolaanrekkning, Keesomkracht).**

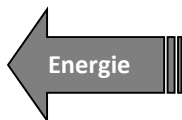


**Figuur 3.3: Dipool-dipoolkrachten tussen polaire moleculen**

(boven) Elektrostatistische aantrekking tussen twee binaire polaire HCl moleculen. Het dipoolmoment van elke molecule is gericht van H naar Cl (grijze pijl). Het partieel negatief geladen Cl-deel van één HCl molecule wordt aangetrokken door het partieel positief geladen H-deel van een andere HCl molecule. Deze IMK (aantrekking) houdt de moleculen bij elkaar.

(onder) Als gevolg van de dipool-dipool aantrekking (IMK) gaan polaire moleculen zich schikken met hun partieel negatieve zijde naar de partieel positieve zijde van nabuurmoleculen (pas op - en + wijzen hier op  $\delta^-$  en  $\delta^+$ , dus partiële ladingen). Een aantal mogelijke schikkingen zijn getoond. De getoonde schikking van dipolen van de twee HCl moleculen (boven) en in het kader (linksonder) wordt kop-staartschikking genoemd.

De dipool-dipoolkrachten (IMK) tussen polaire moleculen zijn **zwak** in vergelijking met de krachten die gepaard gaan met de covalente bindingen die de moleculen opbouwen. Globaal kan men stellen dat dipool-dipoolkrachten ongeveer **100 maal** minder sterk zijn dan covalente bindingen.



*Elektrostatistische aantrekkingskrachten tussen (partieel) geladen deeltjes en de ermee gepaard gaande daling in (potentiële) energie treden pas op als de **afstand**  $r$  tussen de geladen deeltjes voldoende klein is (zie figuur in bijlage 3 over energie!).*

Ook dipool-dipoolkrachten zijn (net als alle IMKs) pas werkzaam als de moleculen elkaar **voldoende dicht** naderen en ze **nemen** heel snel **af in sterkte naarmate de afstand** tussen de polaire moleculen **groter** wordt:



De **energiestabilisatie door dipool-dipoolkrachten** tussen twee polaire moleculen met nettodipoolmomenten  $\mu_1$  en  $\mu_2$  is:

$$E \approx -\mu_1\mu_2/r^3$$

*$r$ : de afstand tussen de massacentra van de moleculen*

*het negatief teken wijst op aantrekking, '≈' staat voor: 'rechtevenredig met'*

Dit betekent dat als de afstand tussen de twee moleculen verdubbelt, de aantrekkingsenergie met  $1/8$  ( $1/2^3$ ) kleiner wordt.

Dipool-dipoolkrachten zijn bijgevolg aantrekkingskrachten met een relatief **korte reikwijdte** ('shorter-ranged') in vergelijking met bijv. de elektrostatistische aantrekking tussen ionen: bij ionen geldt immers  $E \approx 1/r$  (zie bijlage 3 energie).

Uit de formule voor  $E$  volgt ook: Hoe **meer polair** de moleculen (dus hoe hoger de waarde van de nettodipoolmomenten  $\mu_1$  en  $\mu_2$  van de interagerende moleculen), hoe **sterker** de dipool-dipoolkracht.

Het verband tussen  $E$  en  $r$  geldt enkel voor twee dipolen in gefixeerde kop-staartschikking (zie figuur 3.3): Wanneer de twee dipolen niet mooi op één lijn liggen, maar onder één hoek, wordt de aantrekking kleiner.

De 'zwakke' en 'short-ranged' aantrekkingskrachten tussen polaire moleculen zullen enkel de moleculen bij elkaar kunnen houden als de intermoleculaire aantrekkingsenergie **gelijk of groter** is dan de **energie van beweging** die moleculen bezitten bij een bepaalde temperatuur. Moleculen bewegen (roteren, vibreren) meer bij hogere temperatuur (zie Bijlage 3 energie) en dit zal hun onderlinge aantrekking bemoeilijken (zie ook verder §3.3.2.3). Bij hogere temperatuur wordt de oriëntatie tussen de dipolen ook meer en meer willekeurig en wordt de kans dat de dipolen bijv. op één lijn liggen en elkaar ~maximaal aantrekken kleiner.

Ter info: De Ned. fysisch W.H. Keesom formuleerde als eerste in 1921 een wiskundige vergelijking voor dipool-dipoolkrachten. In zijn vergelijking wordt rekening gehouden met de negatieve effecten van rotatie tussen de dipolen door thermische energie. Bij een continue willekeurige rotatie tussen de twee dipolen op een afstand  $r$  bij temperatuur  $T$  is de aantrekkingsenergie  $E \sim 1/T$  en zelfs  $\sim 1/r^6$ . Dipool-dipoolkrachten worden ook 'Keesomkrachten' genoemd.


 § 3.3.2.2-3

Vooruitblik: De competitie tussen (of balans tussen) de sterkte van de intermoleculaire aantrekkingskrachten tussen moleculen en hun kinetische energie (~gekoppeld aan de temperatuur) zal essentieel blijken te zijn in het begrijpen van de overgangen tussen aggregatietoestanden.



### 3.2.2 Geïnduceerde dipool-dipoolkrachten: IMK tussen apolaire moleculen

Het optreden van aantrekkingskrachten tussen polaire moleculen is intuïtief eenvoudig voorstelbaar. Echter, moleculen die geen polariteit bezitten (APOLAIRE moleculen) kunnen ook in vloeibare vorm gebracht worden en elkaar dus blijkbaar ook aantrekken.

In een apolaire molecule (bijv.  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $CH_4$ ,  $Cl_2$ ) is de **ladingsverdeling gemiddeld gezien symmetrisch** (Figuur 3.4A): het centrum van (partieel) positieve lading en van (partieel) negatieve lading vallen gemiddeld in de tijd samen en het nettodipoolmoment van de molecule is nul ( $\mu_{netto}=0$ ). Echter, ook in een apolaire molecule zijn de elektronen constant in beweging (in (moleculair) orbitaal, hoofdstuk 2). De beweging van de elektronen in de moleculen noemt met **dispersie** (Lat. *dispersio* 'verstrooiing', verdeling, verspreiding).

De elektronen kunnen bijv. op een tijdstip 1 gedeeltelijk geaccumuleerd zijn aan één zijde van de molecule (Figuur 3.4A). Dit resulteert op dit tijdstip in een  $\delta^-$  lading aan de ene zijde van de molecule en een elektrontekort ( $\delta^+$ ) aan de andere zijde. Dit levert een **tijdelijk dipoolmoment aan de apolaire molecule**.

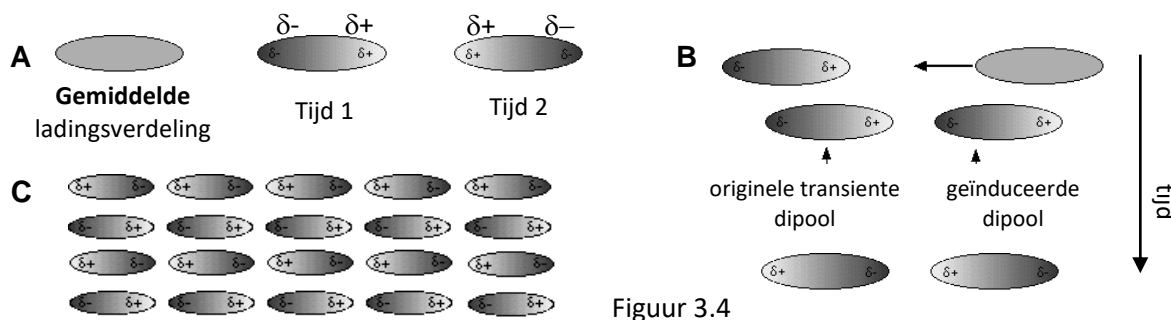
Daar de elektronen in beweging blijven, varieert deze tijdelijke dipool voor een apolaire molecule continu in grootte en richting. Hierdoor is op opeenvolgende ogenblikken (bijv. tijd 1 en 2 in figuur 3.4A) de tijdelijke dipool verschillend georiënteerd. Het continue wisselen van oriëntatie van de tijdelijke dipool in de apolaire molecule wordt **fluctuatie** genoemd.



Door dispersie van de elektronen treden in apolaire moleculen **transiënte (tijdelijke) fluctuerende dipolen** op.

*Dit staat in tegenstelling tot de permanente dipool en dipoolmoment met constante oriëntatie in een polaire molecule.*

Een transiënte dipool in één apolaire molecule op tijdstip 1 zal in een naburige molecule een **dipoolmoment induceren** (Figuur 3.4B). Immers, de positieve zijde van de tijdelijke dipool in molecule 1 trekt de elektronen van molecule 2 aan. Deze laatste molecule verkrijgt hierdoor op zijn beurt tijdelijk een elektronenoverschot aan één zijde ( $\delta^-$ ) en een  $\delta^+$  aan de overliggende zijde: er vormt zich een transiënte dipool die qua oriëntatie dezelfde zal zijn als in de eerste molecule (Figuur 3.4B, midden). Wanneer de dipool in de eerste molecule vervolgens van oriëntatie verandert (door elektronenbeweging), **verandert synchroon** de tijdelijke dipool in de tweede molecule op analoge wijze (Figuur 3.4B, onder). Dit gebeurt ook in een grotere groep van moleculen die op voldoende kleine afstand zitten (Figuur 3.4C).



Figuur 3.4: (A) De symmetrische (homogene) ladingsverdeling ( $\mu_{\text{netto}} = 0$ ) in een apolaire molecule (bijv.  $H_2$ ) is de resultante (gemiddelde over de tijd) van verschillende tijdelijke asymmetrische ladingsverdelingen die continu fluctueren. Dit is getoond voor twee opeenvolgende tijdstippen 1 en 2. Lichtgrijs, minder elektronen; donkergrijs, meer elektronen. Op tijdstip 1 en 2 is voor elke molecule tijdelijk een  $\mu_{\text{netto}} > 0$  aanwezig, op tijd 1 en 2 is deze  $\mu_{\text{netto}}$  tegengesteld in richting. (B) De tijdelijke (transiente) dipool in een molecule 1 induceert een dipool in de nabuurmolecule 2 bij onderling naderen. De dipolen in beide moleculen fluctueren synchroon in de tijd (zie tekst voor details). (C) Geïnduceerde dipool-dipoolkrachten in een populatie van apolaire moleculen. De moleculen aligneren en de tijdelijke dipolen in alle moleculen fluctueren synchroon (bron figuur: <http://www.chemguide.co.uk/atoms/bonding/vdw.html>)

De beschreven onderlinge aantrekkingskracht of IMK tussen apolaire moleculen wordt **geïnduceerde dipool-dipoolkracht** genoemd. Andere veel gebruikte benamingen zijn **dispersiekracht** (omdat de dispersie van de elektronen aan de basis van de aantrekking ligt) en **Londonkracht** (Fritz London stelde in 1930 de dispersiekracht voor ter verklaring van de aantrekking tussen apolaire moleculen.) *De term van der Waals interactie wordt in deze cursus enkel gebruikt als verzamelnaam voor alle types intermoleculaire aantrekking (Figuur 3.2).*

### Samenvatting:

Apolaire moleculen bezitten transiënte, fluctuerende dipolen en induceren deze in nabuurmoleculen.

Deze transiente dipolen in naburige moleculen fluctueren synchroon in de tijd en vormen de basis voor elektrostatische aantrekking tussen apolaire moleculen.

Aangezien deze aantrekking gebaseerd is op de inductie van dipolen, wordt deze intermoleculaire aantrekkingskracht (IMK) **geïnduceerde dipool-dipoolkracht** genoemd (Londonkracht, dispersiekracht).

De geïnduceerde dipool-dipoolkracht is **zwak** in vergelijking met covalente bindingen.

De **sterkte van de geïnduceerde dipool-dipoolkracht** is afhankelijk van:

#### a. De onderlinge afstand $r$ tussen de betrokken moleculen

De Londonkracht heeft een heel korte reikwijdte:

De geassocieerde aantrekkingsenergie is:  $E \approx 1/r^6$

Bijgevolg: verdubbeling van de onderlinge afstand  $r$  betekent 64 maal minder aantrekking.

## b. De polariseerbaarheid $\alpha$ van de betrokken moleculen

De polariseerbaarheid  $\alpha$  is een maat voor 'hoe gemakkelijk' de ladingsverdeling in een neutrale molecule kan 'verstoord' worden, dus hoe makkelijk hierin een tijdelijke dipool (met dipoolmoment  $\mu_{netto}$ ) kan geïnduceerd worden.

Bij moleculen met hoge  $\alpha$  is de geïnduceerde dipool-dipoolkracht sterker en de aantrekkingsenergie  $E$  groter volgens:

$$E \sim -\alpha_1\alpha_2$$

met  $\alpha_1$  en  $\alpha_2$  respectievelijk de polariseerbaarheid van molecule 1 en 2; het negatief teken wijst op aantrekking.



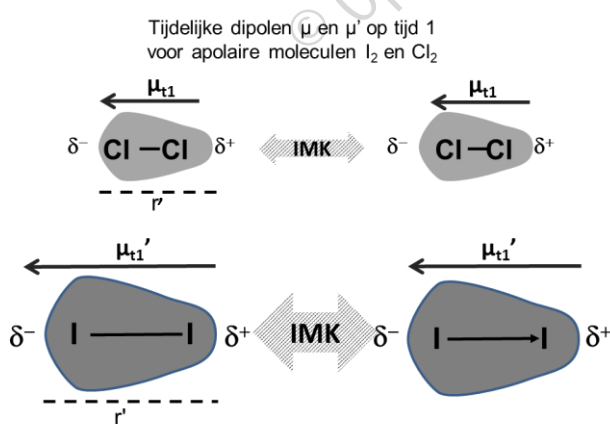
Wat bepaalt de polariseerbaarheid  $\alpha$  van een (apolaire) molecule?:

de **grootte** van de molecule en de **grootte en vorm** van het **oppervlak** van de molecule.

Dit is hieronder in vier punten uitgewerkt:

- In grotere moleculen kunnen de elektronen verder van de kernen verwijderd zitten. Door deze grotere ladingsseparatie zal elke asymmetrische elektronenverdeling (door dispersie en/of inductie) resulteren in een groter tijdelijk dipoolmoment  $\mu$ . De polariseerbaarheid  $\alpha$  is recht evenredig met de grootte van de induceerbare  $\mu$  en  $\mu = |q|r'$  (zie § 2.3.2) met  $r'$  in dit geval de **ladingsseparatie = afstand tussen  $\delta^+$  en  $\delta^-$**  in één molecule. Gevolg: Als  $r'$  groter is, is de molecule meer polariseerbaar.
- Een grotere molecule bezit een groter aantal elektronen. Hierin is de waarschijnlijkheid dat een asymmetrische elektronenverdeling optreedt groter en resulteert dit in een **tijdelijke dipool met grotere waarde voor het dipoolmoment  $\mu$** . Immers  $\mu = |q|r'$  met in dit geval  $q$  recht evenredig met de **absolute waarden van  $\delta^+$  en  $\delta^-$  van de geïnduceerde dipool**.

Het effect van molecuulgrootte op dispersiekrachten wordt geïllustreerd door de vergelijking van de twee halogenen:  $\text{Cl}_2$  met kleine molecuulgrootte en de grotere molecule  $\text{I}_2$  (Figuur 3.5.)



→ polariseerbaarheid  $\alpha$  van  $\text{I}_2 >$   $\text{Cl}_2$

→ bij temp. T:  $\text{IMK}$  tussen  $\text{I}_2 >$   $\text{IMK}$  tussen  $\text{Cl}_2$  ( $>$  = sterker)

→ kookpunt  $\text{I}_2$  ( $184,2^\circ\text{C}$ )  $>$   $\text{Cl}_2$  ( $-34^\circ\text{C}$ )

→ bij  $25^\circ\text{C}$ :  $\text{I}_2$  is een vaste stof,  $\text{Cl}_2$  is een gas (zie ook § 3.3)

Figuur 3.5: Verschil in moleculaire grootte bepaalt polariseerbaarheid.

De moleculen  $\text{I}_2$  en  $\text{Cl}_2$  zijn apolair ( $\Delta EN=0$ ,  $\mu_{netto}=0$ ).

$\text{I}_2$  heeft een grotere diameter dan  $\text{Cl}_2$  en het atoom I telt meer elektronen dan Cl ( $Z=53$ , 53 elektronen in 5 hoofdenergieniveaus) (Cl:  $Z=17$ , 17 elektronen in 3 hoofdenergieniveaus).

Dit resulteert voor  $\text{I}_2$  in een grotere waarde voor de partiële ladingen en voor de afstand  $r'$  en bijgevolg voor de tijdelijke dipolen  $\mu_{netto}$  van  $\text{I}_2$ -moleculen zodat deze moleculen een grotere polariseerbaarheid  $\alpha$  hebben.

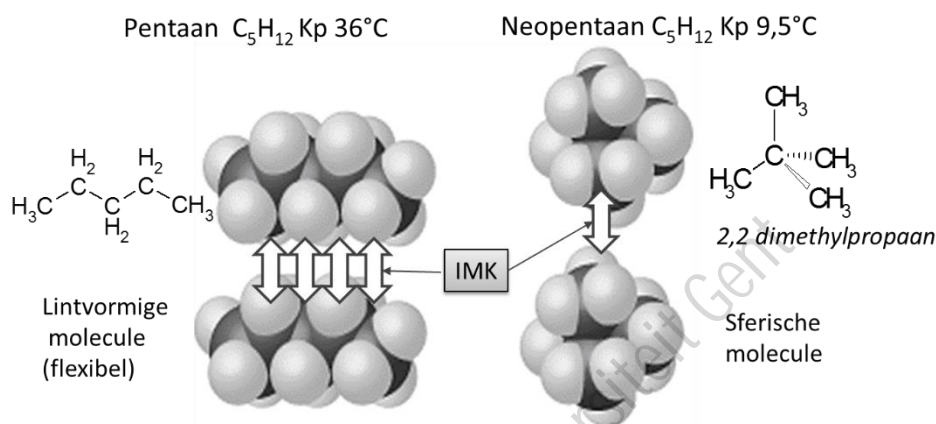
De onderlinge aantrekking (via Londonkrachten, IMK) is bijgevolg **sterker** tussen  $\text{I}_2$ -moleculen dan tussen  $\text{Cl}_2$  moleculen.

Vooruitblik: Het verschil in sterkte van de  $\text{IMK}$  leidt tot een verschil in kookpunt en een verschillende aggregatietoestand bij kamertemperatuur.

§ 3.3



- Een **groter molecuuloppervlak** vergroot de kans op een geïnduceerde dipool met grotere waarde voor  $\mu$  (bv. een lineaire versus sferische molecule met zelfde massa).
- Bepaalde moleculaire vormen laten toe dat de moleculen elkaar dichter kunnen naderen en bij contact een groter contactoppervlak hebben. Lineaire en planaire moleculen kunnen elkaar dichter naderen en over een groter oppervlak contact maken dan vertakte en sferische moleculen (zie Figuur 3.6). Hoe dichter moleculen elkaar kunnen **naderen** en hoe groter hun **contactoppervlak**, hoe **efficiënter** ook de **onderlinge inductie** van de dipool en dus de onderlinge aantrekking.



Figuur 3.6 De moleculen pentaan en neopentaan (2,2 dimethylpropan) zijn apolaire moleculen ( $\mu \approx 0$ ). Ze hebben dezelfde samenstelling  $C_5H_{12}$ , dus dezelfde moleculaire massa (massa per molecule). De moleculen van n-pentaan en neopentaan verschillen echter in de manier waarop de atomen in de moleculen covalent gebonden zijn (zie Deel II, hoofdstuk 2, ketenisomerie). Hierdoor is de vorm van de moleculen verschillend. In vergelijking met de sfeervormige neopentaanmoleculen, kunnen de meer lintvormige moleculen pentaan elkaar dichter naderen en maken ze contact via een groter oppervlak. Door deze verschillende vorm gebeurt de inductie van dipoolmomenten bij naderen van moleculen efficiënter voor de langwerpige pentaanmoleculen. De dispersiekrachten tussen twee naburige pentaanmoleculen zijn hierdoor sterker dan tussen neopentaanmoleculen. Dit verschil in de sterkte van de intermoleculaire aantrekkingskracht uit zich in het duidelijk verschillend kookpunt (hier afgekort met  $K_p$  bovenaan in figuur).

Het verschil in kookpunt ( $K_p$ ) tussen dit type moleculen (nl. ketenisomeren van de alkanen) wordt ook in Deel II besproken.



Dispersiekrachten zijn **niet alleen** werkzaam **tussen apolaire moleculen**, maar **ook** aanwezig wanneer **twee polaire of een apolaire en een polaire molecule** elkaar naderen.

Tussen apolaire moleculen is deze vorm van intermoleculaire aantrekkingskracht echter de enige kracht die de moleculen bij elkaar houdt. Doorgaans levert dit een **zwakkere** aantrekkingskracht op en bijgevolg hebben apolaire moleculen vaak **lage smelt- en kookpunten** en zijn ze vaak **gasvormig** bij kamertemperatuur, bijv.  $CH_4$  methaan (kookpunt:  $-164^\circ C$ ).

§ 3.2.2, 3.3  
& Deel II

**Apolaire moleculen met hoge polariseerbaarheid** kunnen echter elkaar onderling aantrekken via Londonkrachten die relatief gezien verrassend sterk zijn en dit kan tot een hoger kookpunt leiden (zie ook §3.2.5).

### 3.2.3 Waterstofbrugvorming

Waterstofbrugvorming is alomtegenwoordig op aarde en essentieel voor alle leven: het is o.a. verantwoordelijk voor tal van eigenschappen van belangrijke biomoleculen bijv. nucleïnezuren (DNA, erfelijk materiaal) en eiwitten (zie ook Deel III).

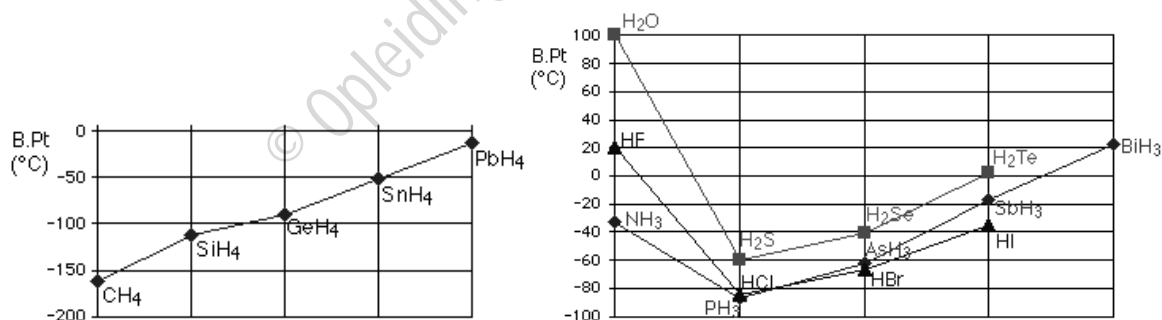
§ 3.2.6



Waterstofbrugvorming (zoals hier gedefinieerd<sup>26</sup>) is de sterkst mogelijk intermoleculaire kracht (IMK) tussen polaire moleculen. Ondanks de ietwat aparte naam, is het net als dipool-dipoolkrachten en geïnduceerde dipool-dipoolkrachten een zwakke (niet covalente) elektrostatische aantrekking tussen moleculen, die vele malen zwakker is dan de covalente bindingen die optreden in de watermolecule.

**Waterstofbrugvorming** is een **sterkere variant van de dipool-dipoolinteractie**: deze wordt gevormd **tussen** een beperkte set van **sterk polaire moleculen** (zie figuur 3.7-9).

Ter eenvoudige illustratie van het optreden van waterstofbrugvorming tonen Figuur 3.7 en 3.8 de kookpunten van de hydriden van de elementen van, respectievelijk, groep IVA en van groep VA, VIA en VIIA uit het Periodiek Systeem. Hydriden zijn de verbindingen die atomen van deze elementen aangaan met waterstofatomen. De **verwachte** tendens is dat naarmate de massa/grootte van de verbinding stijgt, het kookpunt toeneemt (te wijten aan toenemende polariseerbaarheid en dus sterkere dispersiekrachten, zie §3.2.2). Dit blijkt echter enkel zo wanneer men de hydriden van elementen uit groep IVA vergelijkt ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{GeH}_4$ ,  $\text{SnH}_4$ ) (Figuur 3.7). Binnen de reeksen gevormd met elementen uit groep VA, VIA en VIIA hebben de hydriden met de kleinste massa, nl. deze van de elementen N, O en F ( $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  en  $\text{HF}$ ) uitzonderlijke hoge kookpunten (Figuur 3.8). Dit is te wijten aan **waterstofbrugvorming of H-brugvorming**, de sterke intermoleculaire attractie die specifiek optreedt tussen de moleculen van deze verbindingen.



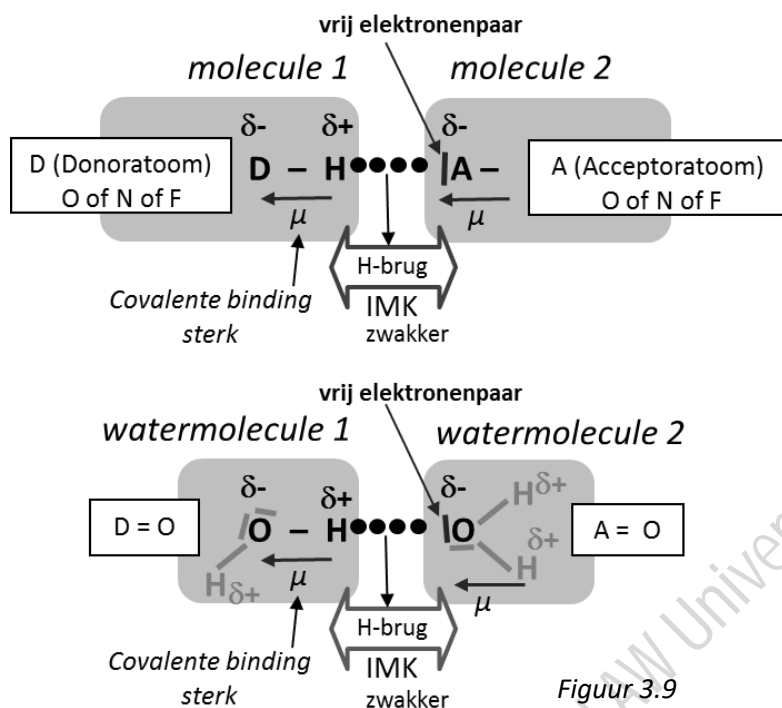
**Figuur 3.7:** Kookpunten ('hier afgekort met B. Pt voor Boiling Point') van de hydriden van groep IVA

**Figuur 3.8:** Kookpunten ('hier afgekort met B. Pt voor Boiling Point') van de hydriden van groep VA (zwartgekleurde  $\diamond$ ), VIA (grijze  $\blacksquare$ ) en VIIA (zwartgekleurde  $\triangle$ ).

$\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{NH}_3$  hebben uitzonderlijk hoge kookpunten: dit wijst op een uitzonderlijk hoge intermoleculaire aantrekking.

<sup>26</sup> Ter info: In 2011 werd door IUPAC een nieuwe definitie aangenomen: voor details zie doi:10.1351/PAC-REP-10-01-01 die een breder bereik omvat van H-brugvorming tussen H en Y in  $(X-H)\cdots(Y-Z)$  (met  $X=D$  en  $Y=A$  in Figuur 3.9) met een corresponderende grotere variatie in aantrekkingsenergie. Voor de context van deze cursus (en vanuit de experimentele gegevens in Figuur 3.8) wordt gekozen om de definitie van  $X-H\cdots Y-Z$  te beperken tot die gevallen waar  $X$  en  $Y = N, F, O$  zijn, dus elementen met hoge EN waarde (m.a.w. de sterkste voorbeelden van H-bruggen binnen de nieuwe definitie van 2011).

In Figuur 3.9 (bovenste deel) zijn schematisch de **voorwaarden** samengevat waaraan twee moleculen dienen te voldoen om elkaar onderling via een H-brug als IMK aan te trekken. Figuur 3.19 (onderste deel) toont dit toegepast op twee watermoleculen.



Figuur 3.9

In **molecule 1 (de donor(D)-molecule)** is een **H-atoom rechtstreeks covalent gebonden op O, N of F.**

O, N, F zijn atomen met hoge elektronegativiteits(EN)-waarden waardoor het valentie-elektron van H (dat gebruikt is in de O-H, N-H of F-H covalente binding) héél sterk van de H-kern weggetrokken wordt. De positief geladen H-kern blijft bijna onbeschermd achter.

Hierdoor ontstaat een **sterk gepolariseerde D-H binding** in molecule 1 met een groot bindingsdipoolmoment  $\mu$  (met  $\delta^-$  op O/N/F en  $\delta^+$  op H). De concentratie aan positieve lading ter hoogte van H is ook heel groot omwille van de kleine diameter van de H-kern.

In **molecule 2 (acceptor(A)-molecule)** is de enige **voorwaarde** dat een **O, N of F**-atoom voorkomt. Deze sterk elektronegatieve elementen uit de 2<sup>de</sup> periode dragen elk minstens één vrij elektronenpaar. De hoge elektronegativiteit (EN) van het acceptoratom A (N, O of F) in molecule 2 samen met het feit dat het vrij elektronenpaar beperkt is tot de kleine diameter van A. (immers: elementen uit periode 2 hebben immers een kleine diameter; in elementen uit hogere periodes is door de grotere diameter van het atoom de negatieve lading meer uitgespreid en dus minder sterk.) Dit resulteert samen in een hoge dichtheid van elektronen ter hoogte van A en dus **heel sterke partieel negatieve lading  $\delta^-$  t.h.v. acceptoratom A (O/N/F).**

→ Tussen de sterke  $\delta^+$  op H van de donormolecule 1 en  $\delta^-$  op atoom 'A' van acceptormolecule 2 ontstaat een **sterke intermoleculaire aantrekking; de waterstofbrug of H-brug.**

De **H-brug (IMK)** is de (grotendeels) elektrostatistische aantrekkingskracht tussen de uitzonderlijk sterke  $\delta^+$  zijde van molecule 1 en de uitzonderlijk sterke  $\delta^-$  zijde van molecule 2. Molecule 1 wordt **donor** genoemd omdat hierin het H-atoom aanwezig is (covalent gebonden op N, O of F). Molecule 2 wordt **acceptor** genoemd.



*De termen donor en acceptor mogen niet geïnterpreteerd worden alsof het H-atoom wordt uitgewisseld. Er is enkel elektrostatistische aantrekkingskracht tussen  $\delta^+$  zijde van de donormolecule waar het H-atoom zich bevindt en de  $\delta^-$  zijde van de acceptormolecule.*

De waterstofbrug is ongeveer **40 maal zwakker** dan een covalente binding, maar wel **de sterkste intermoleculaire kracht (IMK)** die voorkomt (zie § 3.2.5). De sterkte is maximaal in de lineaire configuratie zoals getoond in Figuur 3.9, maar niet-lineaire H-bruggen zijn ook beschreven.

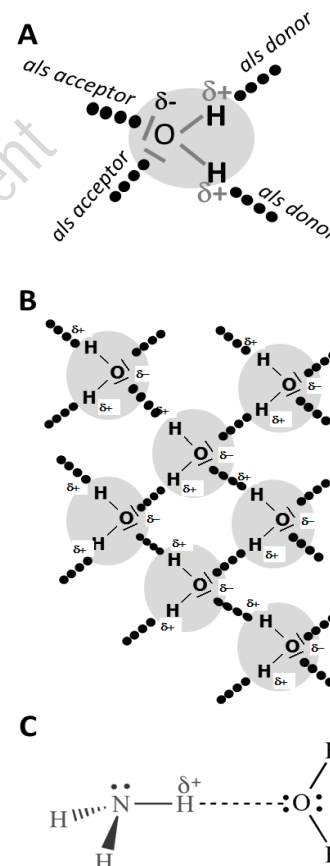


Watermoleculen zijn voorbeelden van moleculen die meer dan één maal waterstofbrugvorming met een naburige molecule kunnen aangaan:

Watermoleculen voldoen tweemaal aan de voorwaarden om als donormolecule op te treden (via elk van de in de molecule aanwezige H-atomen gebonden op O) en tweemaal aan de voorwaarde om als acceptormolecule op te treden (via de twee vrije elektronenparen op O) (figuur 3.10A).

Iedere watermolecule kan dus maximaal vier H-bruggen vormen met naburige watermoleculen (Figuur 3.10B). Dit treedt op in ijs: De maximale waterstofbrugvorming resulteert in een specifieke ruimtelijke ordening van de watermoleculen waarbij de dichtheid (massa/volume-eenheid) lager is dan in vloeibaar water waar de waterstofbrugvorming minder efficiënt optreedt (gemiddeld  $\sim 3,6$  H-bruggen per molecule op ieder moment). Ijs drijft als gevolg hiervan op water.<sup>27</sup>

Waterstofbrugvorming kan optreden tussen **identieke** moleculen bijv. tussen twee watermoleculen (Figuur 3.9, onder) of tussen twee ammoniakmoleculen ( $\text{NH}_3$ , niet getoond).



Figuur 3.10 H-bruggen zijn voorgesteld met 'dotted line' (in A, B) of streeplijn (in C)

Waterstofbrugvorming kan uiteraard ook optreden tussen **niet-identieke** moleculen waarvan één als donormolecule en de tweede als acceptormolecule optreedt. Figuur 3.10C toont één mogelijke waterstofbrugvorming tussen een ammoniakmolecule en een watermolecule.

<sup>27</sup> Bekijk dit interactief op [http://www.edinformatics.com/interactive\\_molecules/ice.htm](http://www.edinformatics.com/interactive_molecules/ice.htm): je vindt er modellen van ijs (bovenaan) en vloeibaar water (onderaan). Als je de instructie Style --> Schemes --> CPK Spacefill volgt wordt het verschil in dichtheid meteen duidelijk! (let wel: Java nodig). Je kan de moleculen ook laten roteren om dit beter te bekijken.

### 3.2.4 Elektrostatistische aantrekking tussen ionen en (a)polaire moleculen

Polaire moleculen (met een permanent dipoolmoment) en apolaire moleculen (die polariseerbaar zijn) komen ook in contact met ionen (positief of negatief geladen deeltjes). Tussen ionen en moleculen treedt ook elektrostatistische aantrekking op (Fig. 3.11).



- a. Wanneer een **ion** (lading  $q$ , positief of negatief geladen, bijv.  $\text{Na}^+$  of  $\text{Cl}^-$ ) in contact komt met een **polaire molecule** (met nettodipoolmoment  $\mu_{\text{netto}} > 0$ ) ontstaat een elektrostatistische aantrekking die **ion-dipoolinteractie** wordt genoemd. Deze aantrekking is qua aard analoog met deze tussen twee ionen of deze tussen twee polaire moleculen en de sterkte ervan wordt bepaald door de **grootte van de ionlading, het dipoolmoment van de polaire molecule en de onderling afstand tussen ion en molecule**.

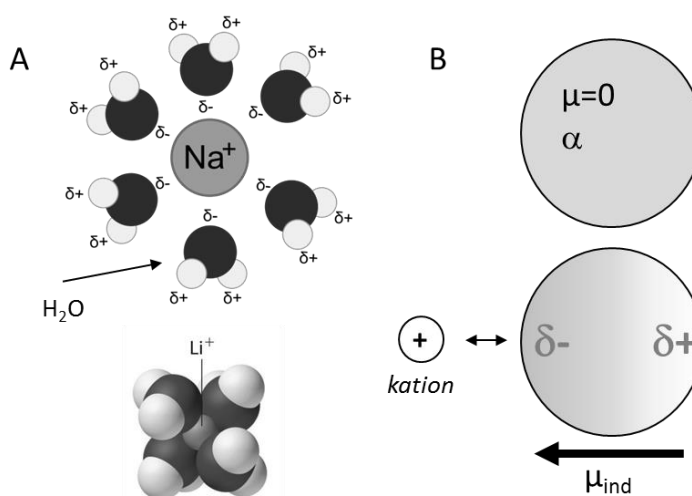
Ion-dipoolinteractie treedt bijv. op als een zout (vaste ionaire verbinding) oplost in  $\text{H}_2\text{O}$  (een polaire oplosmiddel). Het zout splitst in ionen en zowel anion als kation worden aangetrokken door de polaire watermoleculen. Deze watermoleculen oriënteren zich met hun partieel positieve of negatieve zijde naar respectievelijk het anion of kation ((Figuur 3.11A, zie Hoofdstuk 4). Dit proces wordt hydratatie genoemd en met spreekt van gehydrateerde ionen of ionen met een 'watermantel'.

De **ion-dipoolkracht**, hoewel sterker dan de dipool-dipool kracht, blijft een **zwakke IMK** die ook afhankelijk is van de onderlinge afstand  $r$ . De aantrekkingsenergie is  $E \sim -q\mu/r^2$ .

- b. Een **ion** (lading  $q$ ) kan in een **apolaire molecule** (polariseerbaarheid  $\alpha$ ) een asymmetrische verdeling van de elektronen induceren. Op basis hiervan ontstaat een (zwakke) elektrostatistische aantrekking tussen het ion en de molecule waarin de dipool geïnduceerd wordt door het ion (Figuur 3.11B). De geassocieerde aantrekkingsenergie is  $E \sim -q\alpha/r^4$
- c. Een **polaire molecule** met permanente nettodipool  $\mu_{\text{netto}} > 0$  kan in een **apolaire molecule** (met polariseerbaarheid  $\alpha$ ) een tijdelijke dipool induceren. Dit laat toe dat de moleculen elkaar aantrekken en de geassocieerde aantrekkingsenergie is  $E \sim -\mu\alpha/r^6$ . Deze aantrekkingskracht worden ook Debye-kracht genoemd.

**Figuur 3.11: (A):** Ion-dipoolinteractie tussen een natriumkation en watermoleculen. De watermoleculen zijn polair met  $\delta^-$  t.h.v. het O-atoom (zwart) en  $\delta^+$  t.h.v. H-atomen (lichtgrijs). Een elektrostatistische interactie ontstaat tussen de  $\delta^-$  zijde van de dipool van elke watermolecule en het positief geladen ion. Onderaan: watermantel rond een lithiumkation met meer realistische verhoudingen van de grootte van de deeltjes en hun stapeling. Dit toont de afscherming van de ionlading door de watermoleculen.

**(B)** Elektrostatistische aantrekking tussen een kation en een apolaire molecule (met  $\mu_{\text{netto}} = 0$  zoals bovenaan getoond) en met polariseerbaarheid  $\alpha$  is gebaseerd op de inductie van een dipool (met dipoolmoment  $\mu_{\text{ind}}$ ) in de apolaire molecule door het ion.



Bron (A) <http://bio.winona.edu/berg/ILLUST/Na+H2O.gif>, public domain via Wikimedia Commons en Principles of General Chemistry v. 1.0

### 3.2.5 Relatieve sterkte van de verschillende types zwakke krachten

We hebben in de hoofdstukken 2 & 3 de volgende indeling van de verschillende 'chemische krachten' gehanteerd:

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>• Metaalbinding (<u>tussen</u> metaalatomen, <b>IN</b> metaalverbinding)</li> <li>• Ionbinding (ionbinding <u>tussen</u> ionen, <b>IN</b> zout in vaste vorm)</li> <li>• Covalente Binding (tussen atomen <b>IN</b> moleculen)</li> </ul> |
|--|
- **Zwakke krachten** (tussen moleculen (= IMK), soms tussen ionen en moleculen)
    - Ion-dipoolkracht (tussen een ion en een polaire molecule)
    - Waterstofbruggen (tussen polaire moleculen van de vorm (X-H) ... (Y-) met X,Y= N,F,O)
    - Dipool-dipoolkracht (tussen twee polaire moleculen)
    - Ion-geïnduceerde dipoolkracht (tussen ion en apolaire molecule)
    - Dipool-geïnduceerde dipoolkracht (Debye-kracht) (tussen polaire moleculen en apolaire molecule)
    - Dispersiekracht (Londonkracht, geïnduceerde dipool-dipoolkracht) (tussen apolaire moleculen)

Deze indeling is voornamelijk gebaseerd op de **sterkte** van de krachten.

- De drie eerste in de lijst zijn **sterke krachten** (in kader) waarbij het 'verbreken' van deze krachten leidt tot een verlies van 'identiteit' (zeker bij een vast zout (verbreken ionbinding) en bij een molecule (verbreken covalente binding)). Het hoge smeltpunt van een zout of een metaalverbinding is een maat voor de sterkte van respectievelijk de ion- en metaalbinding (zie hoofdstuk 2). De bindingsenergie is een maat voor de sterkte van een covalente binding (zie §2.8).
- De overige krachten zijn **zwakke krachten**. Bij het overwinnen van deze aantrekkingskrachten blijft de identiteit van de deeltjes behouden (zie ook § 3.1, §1.1). Het smelt- en kookpunt vormen een indicatie van de relatieve sterkte van de zwakke kracht tussen de moleculen/deeltjes in zuivere vorm (zie §3.3).

#### De relatieve sterkte van de verschillende types IMKs

Enkele bruikbare regels:



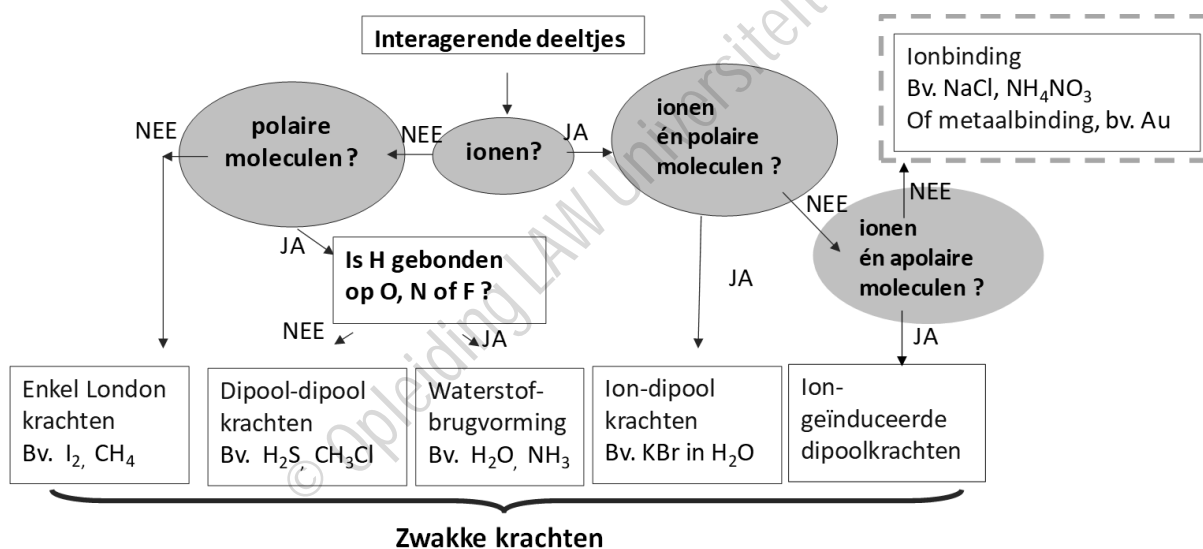
1	<b>Geldt steeds:</b>	<b>Covalente bindingen ionbinding metaalbinding</b>	>>>	<b>Zwakke krachten</b>
2	<b>Geldt voor alle moleculen</b>	<b>Bij toenemende massa/grootte</b>	→ <b>toenemende sterkte van Londonkrachten</b>	
3	<b>Geldt voor moleculen van vergelijkbare grootte/vorm:</b>	<b>H-brugvorming +Londonkracht</b>	>	<b>(Ion-dipoolkracht &gt;) Dipool-dipool interacties +Londonkracht</b> > <b>London krachten</b>
4	<b>Geldt steeds:</b>	<b>Polaire moleculen gebruiken dipool-dipoolkrachten (of mogelijk H-brugvorming)+Londonkrachten; dus beide in rekening brengen</b>		

Mogelijke situaties:

- ✓ Stel: moleculen 1 en 2 met eenzelfde (of sterk vergelijkbare) massa en vorm waarbij molecule 1 polair is ( $\mu_{\text{netto}} > 0$ ) en molecule 2 apolair ( $\mu_{\text{netto}} = 0$ ).  
De Londonkrachten zullen voor beide moleculen even sterk zijn (regel 2). Moleculen 1 zullen echter sterkere IMK op elkaar uitoefenen omwille van de optredende dipool-dipoolkrachten. De IMK tussen moleculen 1 zal steeds sterker zijn dan tussen moleculen 2. (regel 3)
- ✓ Stel molecule 1 en 2 zijn beide apolair maar molecule 1 is aanzienlijk groter/volumineuzer dan molecule 2. De IMK tussen moleculen 2 zal sterker zijn dan tussen moleculen 1 (regel 2)
- ✓ Stel molecule 1 en 2 verschillen sterk van grootte. Molecule 1 is klein maar heeft een dipoolmoment. De sterkere Londonkrachten van de grotere molecule zijn echter (doorgaans) doorslaggevend. Dus tussen grote apolaire moleculen (met grote polariseerbaarheid) kan de Londonkracht sterker zijn (met hogere attractie-energie, (en zie §3.3 hoger kookpunt)) dan tussen kleine polaire moleculen (regel 2+4)

Onderstaand beslissingsschema is een hulpmiddel om af te leiden welk type (zwakke) kracht werkzaam is tussen specifieke deeltjes.

Uiteraard is het zo dat voor alle moleculen de dispersie- of Londonkrachten samen met de uitkomst van dit beslissingsschema werkzaam zijn (niet overal getoond).



### 3.2.6 (Biologisch) Belang van intermoleculaire, niet-covalente krachten



Via een aantal voorbeelden en Figuur 3.12 wordt het grote belang van de zwakke IMKs geïllustreerd. Dit vormt een vooruitblik op wat verder besproken wordt in Deel I, II, III. Er werden vnl. voorbeelden gekozen uit het veld van biochemie en biologie. Niet-covalente interacties zijn uiteraard ook van belang in andere stoffen en onderzoeksvelden (bijv. in (nano)materiaalstudie en -ontwerp). H-brugvorming bijv. is aanwezig in veel kleurstoffen en pigmenten, in bepaalde types van (semi)geleiders en in nylon (zie ook Deel II); het vormt ook de basis van de grote sterkte van de synthetische aramide-polymeren (bijv. Kevlar™ (DuPont)) gebruikt in kogel- en scherfwerende vesten, sleepkabels, bootzeilen, rompen van kano's en kajaks, brandwerende kleding, uitrusting voor extreme sporten, lekvrije fietsbanden ... Het aantal situaties waarin zwakke krachten een rol spelen is enorm groot...

**1. Hydrofiel versus hydrofoob.** Een mens bestaat voor ongeveer 60 % uit water, de grote meerderheid van de biologisch belangrijke chemische reacties gaan door in waterig milieu. Gezien dit belang van water op aarde en in biologisch leven is de mogelijkheid om via zwakke krachten al dan niet met watermoleculen te kunnen interageren een bepalende eigenschap van moleculen of chemische deeltjes. Deeltjes die dit wel kunnen worden **HYDROFIEL (waterminnend, polair)** genoemd. Deeltjes die dit niet kunnen **HYDROFOOB (watervrezend, apolair)** (Figuur 3.12A).



Dit vormt de basis van tal van fenomenen en (vernieuwende) toepassingen in ons dagelijks leven (bijv. waterafstotende regenkledij, anti-condenserende brilglazen, autowas, behandelingen van je smartphonescherm tegen vingerafdrukken, 'de-icing' van vliegtuigvleugels, collecteren van olie uit de oceaan...).

Bekijk de verhalen in <http://www.sierraclub.org/sierra/2014-6-november-december/innovate/harvesting-water-thin-air#1>; <http://nanofixit.com/#1450149383455-2f05bcad-49e9>, <http://www.popsci.com/iceproof-coating-airplanes-based-frogs-skin>, <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/nr/c7nr03829a#!divAbstract..>

#### 2. 'Zonder IMK geen dierlijk leven': Belang van zwakke krachten in de opbouw van en interacties tussen biologische macromoleculen

- **Eiwit**<sup>28</sup> (Deel III): deze biomolecule kan je zien als een keten van bouwstenen (aminozuren, Deel III). Deze keten heeft een welbepaalde driedimensionale opvouwing en dus 3D-vorm die essentieel is voor de functie van het eiwit. Deze opvouwing is mogelijk doordat verschillende chemische groepen van de bouwstenen elkaar via **zwakke krachten** aantrekken (Figuur 3.12B). Recent (2016) helderde men bijv. de zwakke krachten op die de opvouwing en aggregatie bepalen van het korte eiwit  $\beta$ -amyloid peptide (A $\beta$ ). Dit eiwit speelt een rol bij de vorming van 'plaques' in de hersenen en heeft hierdoor een belangrijke bijdrage in de progressie van Alzheimer. Kennis hiervan zal medicijnontwikkeling versnellen.

<sup>28</sup> De gedetailleerde opbouw van **eiwitten** komt later in de cursus kort aan bod (Deel III). Eiwitten zijn complexe chemische moleculen met een welbepaalde driedimensionale structuur. Eiwitten voeren in levende wezens het 'programma' uit dat in het erfelijk materiaal ligt opgeslagen. Hiertoe interageren ze op specifieke wijze met tal van andere biomoleculen en hun driemensionele structuur is essentieel in herkennen van en communiceren met deze partnermoleculen. De naam '**enzymen**' wordt gebruikt voor eiwitten met katalytische activiteit (zie hoofdstuk 5) en deel III.



- **Eiwitcomplexen:** In ons lichaam vormen eiwitmoleculen continue op een heel specifieke wijze complexen met andere eiwitmoleculen. De oppervlakken van deze eiwitten bevatten groepen die 'elkaar vinden' (als de sleutel in een slot) en interageren via **zwakke krachten** (Figuur 3.12C). Een voorbeeld van een essentieel eiwitcomplex: een antilichaam (eiwitmolecule) bindt op een bacterieel eiwit of viraal eiwit bij immuunrespons. Eiwitten gaan **via zwakke krachten** ook interacties aan (i) met eenvoudige chemische moleculen bijv. het enzyme lactase dat lactose (melksuiker) bindt en splitst in glucose (bloedsuiker) en galactose; het eiwit hemoglobine dat  $O_2$  bindt in rode bloedcellen, (ii) met DNA (het enzyme DNase (eiwit) bindt en verknijpt DNA-moleculen, transcriptiefactoren (eiwitten) binden DNA om een bepaald gen te activeren, (iii) met vetmoleculen. Dit geldt bv. voor eiwitten aanwezig in het celmembraan, bij cholesteroltransport in bloed...
- **DNA dubbelhelix:** De moleculen die de erfelijke informatie dragen zijn opgebouwd uit twee lange strengen die via **H-brugvorming** op heel specifieke wijze samenblijven. (Figuur 3.12D)

### 3. Zonder IMK geen 'cellen': Belang van zwakke krachten in opbouw van biologisch belangrijke structuren (zie ook Deel III).

Een cel kan een eigen micromilieu behouden (d.w.z. een geschikte concentratie aan moleculen, aan ionen) doordat ze van de buitenwereld is afgescheiden door een weinig permeabele scheidingswand, het celmembraan. Figuur 3.12E toont dat deze bestaat uit vetmoleculen die een dubbel karakter hebben: deels **polair** en deels **apolair**. Via **Londonkrachten** trekken de apolaire 'staarten' elkaar aan; via de polaire 'kop' gaan de vetmoleculen via o.a. **dipool-dipoolkrachten** interacties aan met elkaar en met polaire moleculen (o.a. water). In waterig milieu vormen deze vetmoleculen dubbellen die binnenin apolair (hydrofoob) zijn. Polaire moleculen kunnen hier niet zomaar doorheen of enkel op gecontroleerde wijze door de werking van specifieke 'kanaaleiwitten' in het membraan.



**4. Zonder IMK geen functioneel bloedtransport:** Voor cellen is toevoer en afvoer van nutriënten, ionen, afvalstoffen, hormonen, vitaminen, afweermoleculen ... essentieel. Dit gebeurt via de bloedbaan en deze stoffen dienen in het bloed op te lossen voor transport. Vervoer van ionen steunt bijv. op **ion-dipoolinteractie met water (hydratie)**, zie fig 3.11). Voorbeelden van biologisch belangrijke ionen zijn  $Na^+$ ,  $K^+$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ . Suikermoleculen zoals glucose wordt analoog onder gesolvateerde vorm vervoerd nl. via een **dipool-dipoolinteractie** tussen de suiker- en watermoleculen (Figuur 3.12F). **Solvatie** verzekert ook het transport van andere polaire moleculen doorheen het vasculair systeem van levende organismen.



**5. Zonder IMK: risico op oververhitting!** De warmtehuishouding van warmbloedige organismen gaat deels terug op de H-brugvorming van water. Verdampen van water vereist relatief veel energie omdat bij de overgang van de vloeibare naar de gasfase het **netwerk van H-bruggen** tussen de watermoleculen dient verbroken te worden (verdampen, zie §3.3.3). Warmbloedigen benutten dit en spelen een deel van hun lichaamswarmte (die komt van de eigen metabole reacties en/of van de omgeving) kwijt door water te verdampen. Deze verdamping gebeurt ter hoogte van de huid en in de longen.

**6. Zonder IMK geen spreken!** Zie bijvoorbeeld rol van **hyaluronzuur** in stembanden in inleiding cursus en in lesdia's.

## Hoe kunnen zwakke krachten van belang zijn als ze 'zwak' zijn? Vele kleintjes maken één groot; nuttige vergelijking Velcro (Figuur 3.12 G)



Wanneer zich tussen twee macromoleculen slechts enkele niet-covalente (zwakke) interacties zouden vormen, zou dit niet voldoende zijn om deze grote moleculen bij elkaar te houden. Immers de individuele zwakke krachten dragen energetisch weinig bij tot de stabiliteit van het complex (energiedaling is klein).

Echter, tussen de contactoppervlakken van grote biologische moleculen zoals DNA en eiwitten treden heel veel dergelijke zwakke aantrekkingen op. De som van de individuele energiebijdragen van elk van deze interacties resulteert in voldoende stabiliteit voor interactie. Bovendien is het zo dat tussen twee macromoleculen die elkaar aantrekken de krachten niet onafhankelijk werken. Wanneer tussen een deel van de chemische groepen aantrekking optreedt, brengt dit weer andere groepen dicht genoeg bij elkaar om attracties op elkaar uit te oefenen. Dit wordt **co-operativiteit** genoemd.

## Welk voordeel levert het zwak karakter vanuit biologisch standpunt?



Een belangrijke visie is dat het zwak karakter van intermoleculaire aantrekking deze aantrekkingen dynamisch maakt (dus niet statisch of onveranderlijk). Als je elkaar aantrekkende moleculen beschouwt als onderdelen van machines op moleculaire schaal dan vereist hun werking vaak een delicate balans tussen samenwerken en loslaten. Een dergelijke subtiele werking is enkel mogelijk door zwakke interacties aangezien sterke krachten de machines rigid en weinig regelbaar zouden maken.

De DNA dubbelhelix illustreert dit: de waterstofbrugvorming moet op welbepaalde plaatsen of tijdstippen opgegeven worden (a.h.w. openritsen) opdat de DNA moleculen kan dupliceren (bij celgroei) of worden 'overgeschreven' ('transcriptie' of maken van RNA kopijen met een boodschapperfunctie, zie deel III).

Een ander fascinerend voorbeeld zijn de motormoleculen die in cellen over lange eiwitvezels bewegen en dankzij zwakke krachten telkens weer met de vezels interageren en loslaten (bekijk <http://i.imgur.com/vEOPekG.gif>).

Een macroscopisch voorbeeld vindt men bijv. bij gekko's die via een heel groot aantal zwakke Londonkrachten t.h.v. hun pootbasis niet alleen heel stevig op een verticale wand of plafond kunnen vasthangen maar deze ook kunnen beklimmen (door kracht uit te oefenen onder een bepaalde hoek kunnen de Londonkrachten één voor één en dus met weinig energiekost losgemaakt worden (Figuur 3.12 H). Wetenschappers onderzoeken dit in functie van het ontwikkelen van 'superlijm'.<sup>29</sup>

### Figuur 3.12

(A) Dauwdruppels op een apolaire oppervlak (gras) (<https://www.flickr.com/photos/10449804@N00/>).

(B) Opvouwing van een keten van bouwstenen tot een functionele driedimensionale structuur (een eiwitmolecule) steunt o.a. op zwakke krachten. Een aantal interacties tussen delen van de eiwitketen zijn getoond (onderaan).

(C) Complexvorming tussen eiwitten. De complementaire oppervlakken binden op elkaar (links) en deze binding wordt gestabiliseerd door héél véél zwakke interacties t.h.v. contactoppervlak ([www.boundless.com](http://www.boundless.com)). Een aantal types niet-covalente krachten zijn getoond: Londonkracht tussen twee apolaire methyl(-CH<sub>3</sub>) groepen en H-brugvorming.

(D) Tussen de twee strengen van de DNA dubbelhelix zijn H-bruggen aanwezig. Elk van de bouwstenen van één streng is betrokken in de vorming van twee of drie H-bruggen met een bouwsteen in de andere streng. De twee strengen kunnen dynamisch openen en sluiten door overwinnen of hervormen van deze zwakke krachten. Pray, L. (2008) Discovery of DNA structure and function: Watson and Crick. Nature Education 1(1):100.

(E) Schematische voorstelling van de celmembraan: dit is een dubbellaag bestaande uit vetmoleculen met een hydrofobe deel (staarten) en een hydrofiel deel (kop, zwarte bol).

(F) De polaire, hydrofiële molecule glucose bevat tal van plaatsen voor waterstofbrugvorming met watermoleculen (pijlen).

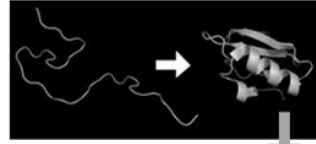
(G, H) Velcro: voorbeeld van een kracht steunend op heel veel zwakke interacties. Gecko-poten<sup>26</sup> bestaan analoog uit een heel fijne structuur met een enorm groot aantal 'spatula pads' (1 µm) die via Londonkrachten interageren met bijv. een gladde wand. Samen resulteert dit in een kracht die sterker is dan de zwaartekracht. Indien onder een bepaalde hoek een kracht wordt uitgeoefend op de aanhechtingsplaats (zie uiterst rechts), laat de poot zonder veel moeite los.

29 Uit Tian Y, Pesika N, Zeng H, Rosenberg K, Zhao B, McGuiggan P, Autumn K, Israelachvili J. Adhesion and friction in gecko toe attachment and detachment. Proc Natl Acad Sci U S A. 2006 Dec 19;103(51):19320-5.; bekijk ook <http://www.geek.com/news/humans-finally-figure-out-how-to-climb-buildings-using-artificial-gecko-feet-1609924/>.

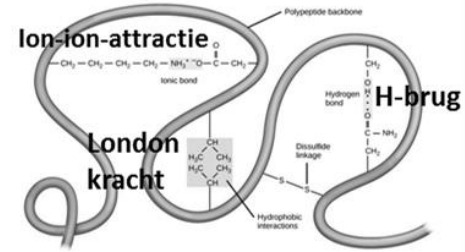
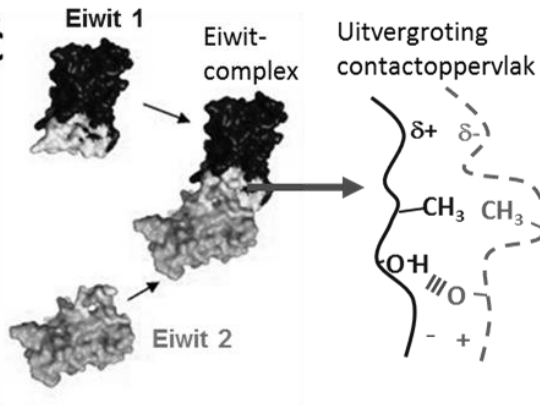
A



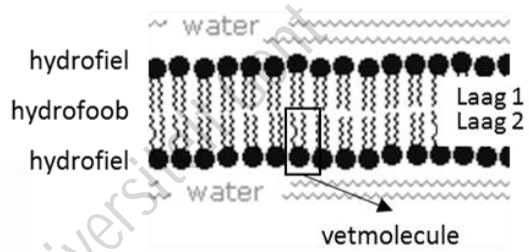
B



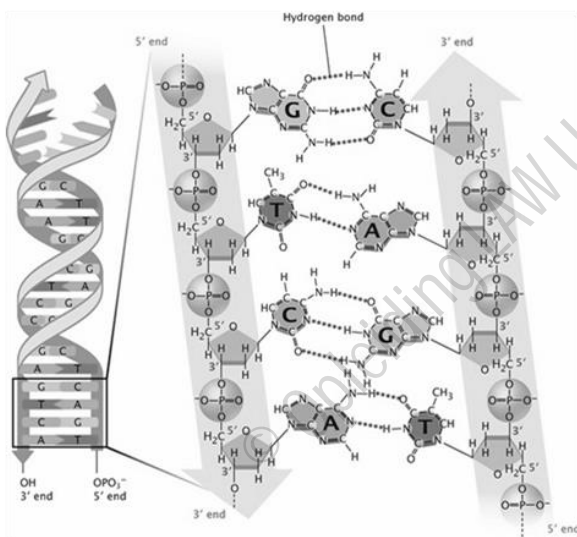
C



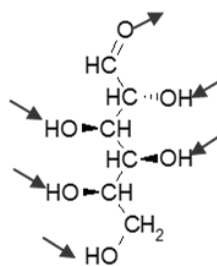
E



D



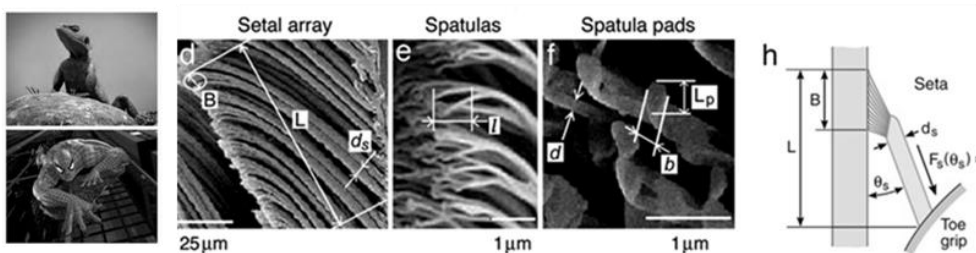
F



G



H



## 3.3 DE AGGREGATIETOESTANDEN VAN DE MATERIE

### 3.3.1 Inleiding



In hoofdstukken 1, 2 en 3 werden reeds de eigenschappen van atomen, ionen en moleculen beschreven en daaruit werden eigenschappen als lading (voor ionen), vorm en polariteit en onderlinge aantrekking (voor moleculen) afgeleid. In het laatste deel van dit derde hoofdstuk gebruiken we deze kennis om macroscopische meetbare eigenschappen van voornamelijk moleculen te verklaren en vragen te leren beantwoorden zoals: Waarom zijn bepaalde chemische verbindingen een gas bij gangbare druk en temperatuur (1,0 atm, 25°C), terwijl andere vloeibaar of vast zijn? Uit vorige paragrafen volgt reeds dat het polair karakter van de moleculen en de sterkte van de intermoleculaire krachten hierbij een cruciale rol zal spelen.

Een chemische verbinding kan als **gas**, als **vloeistof** of als **vaste stof** voorkomen. Dit worden de **drie aggregatietoestanden** genoemd.

Tabel 3.2 toont voor de drie aggregatietoestanden een aantal waarneembare eigenschappen of intuïtief daaruit af te leiden eigenschappen bijv. intermoleculaire afstand, en bijgevolg ook intermoleculaire aantrekking. Uit deze tabel is duidelijk dat vloeibare en vaste fase meer op elkaar lijken. Men noemt deze dan ook vaak de gecondenseerde fasen.

Tabel 3.2

	Gas	Vloeistof	Vaste stof
Volume en vorm	Zet uit en vult het volume van de container waarin het zich bevindt (expansie); neemt de vorm aan van de container.	Bezit een vast volume voor een welbepaalde massa bij bepaalde temperatuur; neemt de vorm aan van de container waarin het zich bevindt	Bezit een vast volume voor een welbepaalde massa bij bepaalde temperatuur; bezit een vaste vorm.
Dichtheid	laag	hoog	hoog
Samendrukbaarheid	hoog	heel laag	nagenoeg onsamendrukbaar
Intermoleculaire afstand	heel groot	deeltjes maken contact	deeltjes maken contact

Het is experimenteel en ook uit het dagdagelijkse leven duidelijk dat om naar een minder gecondenseerde fase over te gaan (bijv. van vloeistof naar gas) men **energie** (bv. warmte) dient toe te voegen (zie ook Tabel 3.1B).

De aggregatietoestanden en overgangen hiertussen fascineerden reeds de eerste experimentele onderzoekers (17-19<sup>de</sup> E). Hun kwantitatieve observaties (bv. meting van volumes bij verschillende druk of temperatuur) leidden voor de gasvormige aggregatietoestand tot een aantal **wetten** waarmee het gedrag van voornamelijk gassen vrij goed kon voorspeld worden (zie § 3.3.3.3).

Een **verklaring** voor de experimentele waarnemingen en wetten, kwam er met de **kinetische moleculaire theorie**. Deze werd ontwikkeld voor de gasfase ("*The Theory Of Moving Molecules*"; *Rudolf Clausius, 1857*) maar vormt vandaag een belangrijke basis voor de beschrijving van alle vormen van materie en wordt bijgevolg eerst besproken (§3.3.2).

## 3.3.2 De Kinetisch Moleculaire Theorie

### 3.3.2.1 Concepten

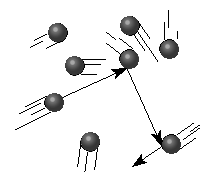
De **kinetisch moleculaire theorie (KMT)** is een verklarend model van de materie dat vertrekt van het gedrag van de individuele deeltjes (bijv. moleculen).



Deze theorie verklaart de fysische veranderingen in materie op '**moleculaire**' schaal en steunt hierbij op de fysische wetten van beweging en van energie toegepast op moleculen.

Dit model wordt formeel uitgedrukt met behulp van wiskundige vergelijkingen voor kracht, beweging en energie maar kan eenvoudig worden samengevat in volgende **vier concepten**. Deze concepten zijn bruikbaar voor alle aggregatietoestanden; voor de gasfase worden een aantal additionele veronderstellingen gemaakt (zie § 3.3.3.1)

1. Alle materie bestaat uit een collectie van kleine (submicroscopische) partikels: bijv. moleculen of atomen.
2. Deze deeltjes zijn constant in **beweging**. Deze beweging is willekeurig. *Dit betekent dat voor een collectie deeltjes de bewegingen evenredig verdeeld zijn over alle richtingen en met alle mogelijke waarden van energie kunnen doorgaan.*
3. De bewegende deeltjes bezitten kinetische energie (KE). In een kleine hoeveelheid materie (een bepaald volume gas of vloeistof) zijn reeds grote collecties of populaties deeltjes (bijv. moleculen) aanwezig. Daarom definiëren we een **gemiddelde kinetische energie ( $KE_{gem}$ )** voor de collectie deeltjes. Analoog kan men een gemiddelde snelheid  $v_{gem}$  bepalen.



De energie van beweging van een deeltje is enkel afhankelijk van de temperatuur

Bijlage 3

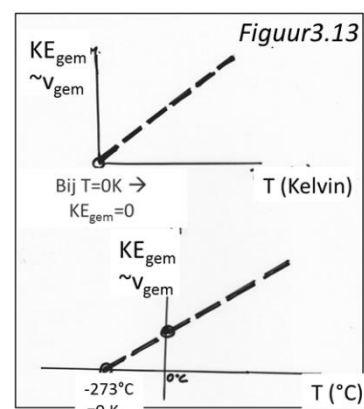


De gemiddelde kinetische energie  $KE_{gem}$  van een populatie van deeltjes is rechtsevenredig met de absolute temperatuur  $T$ :

$$KE_{gem} \sim T$$

Hoe hoger de temperatuur, hoe sneller de deeltjes gemiddeld gezien bewegen en hoe hoger hun gemiddelde kinetische energie. (zie ook §3.3.2.2)

De absolute temperatuur is de temperatuur in **Kelvin (K)**. Deze schaal is absoluut omdat de temperatuurswaarde in Kelvin rechtstreeks in verband staat met de moleculaire beweging (en dus met de gemiddelde snelheid en gemiddelde kinetische energie van de deeltjes). Immers bij het absolute nulpunt  $T=0 \text{ K} = -273,15^\circ\text{C}$  is de  $KE_{gem} = 0$ . (Figuur 3.13)



4. De deeltjes oefenen intermoleculaire (zwakke, niet-covalente, elektrostatische) aantrekkingskrachten op elkaar uit. De mate waarop dit gebeurt, verschilt van aggregatietoestand tot aggregatietoestand.

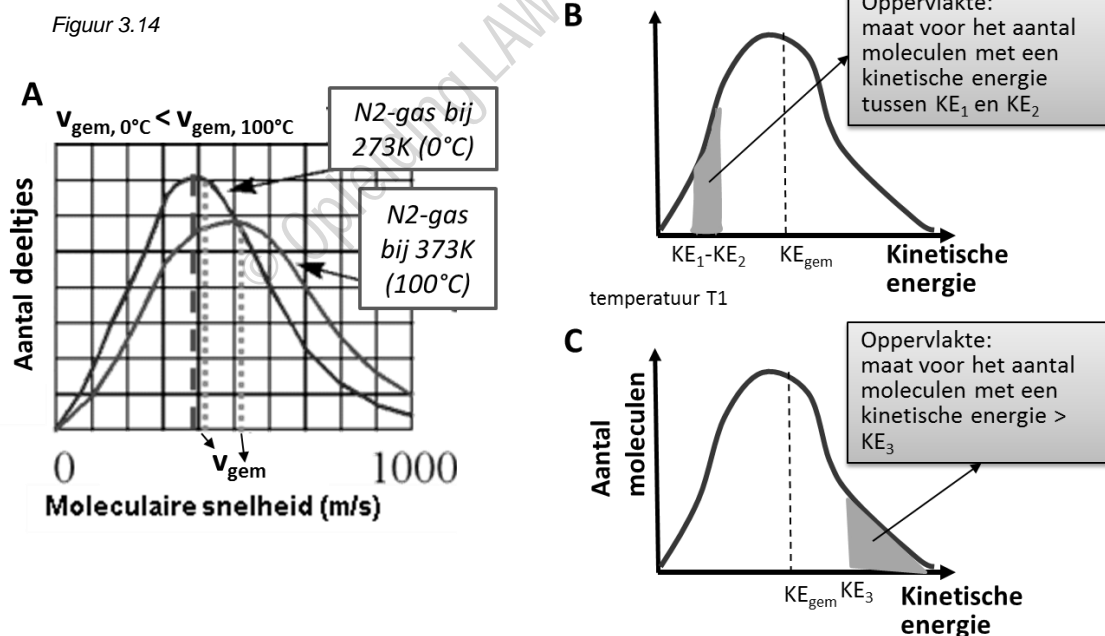
§ 3.2

### 3.3.2.2 De verdeling van kinetische energie in een populatie van deeltjes/moleculen

Uit The Physics Hypertextbook™ (<http://physics.info/>): 'The air molecules surrounding us are not all traveling at the same speed, even if the air is all at a single temperature. Some of the air molecules will be moving extremely fast, some will be moving with moderate speeds, and some of the air molecules will hardly be moving at all. Because of this, we cannot ask questions like "What is the speed of an air molecule in a gas?" since a molecule in a gas could have any one of a huge number of possible speeds.'

Figuur 3.14A toont inderdaad dat in een collectie deeltjes (in stikstofgas  $N_2$ , of ander gas of vloeistof) bij een bepaalde temperatuur  $T$  ( $0^\circ\text{C}$  of  $100^\circ\text{C}$ ) en dus met welbepaalde gemiddelde snelheid en welbepaalde gemiddelde kinetische energie, een specifieke verdeling (distributie, 'range' of bereik) van snelheden (en bijhorende KE) over de deeltjes bestaat. Niet alle individuele deeltjes bezitten dus bij een welbepaalde temperatuur, dezelfde snelheid of energie.

Dit leert dat bij een temperatuur  $T$  in de collectie deeltjes **zowel traag bewegende deeltjes** met een snelheid dicht bij  $0\text{ m/s}$  (Fig. 3.14A) en dus met **lage KE** (Fig. 3.14B)) **als snel bewegende deeltjes** (met moleculaire snelheid dicht bij  $1000\text{ m/s}$  (Fig. 3.14A) en dus met **hoge KE**(Fig. 3.14B)) **samen aanwezig zijn**. De y-as in de getoonde grafieken toont het **aantal** deeltjes of aantal moleculen met een welbepaalde snelheid of KE. De moleculaire snelheid en kinetische energie in een collectie van moleculen bij bepaalde temperatuur vertonen dus beiden een **wijd bereik** (of spreiding). Deze wijde verdeling (of distributie) van snelheden of van kinetische energieën<sup>30</sup> wordt de **Maxwell-Boltzmann-distributie** genoemd.



<sup>30</sup> Ter info: Dit is een eenvoudige manier om deze verdeling te beschrijven. Het is eigenlijk de verdeling van de waarschijnlijkheid dat moleculen met een bepaalde snelheid bewegen ('probability distribution'). Gezien het grote aantal deeltjes en de kleine (moleculaire) schaal is de **grafiek niet het resultaat van een echte meting maar van een berekening van waarschijnlijke snelheden** vertrekkende van meetbare gegevens (temperatuur, aantal deeltjes) en de wetten van de fysica. Deze berekeningen stammen uit 1859–1866 en worden ook Maxwell-Boltzmann statistiek genoemd.

Het maximum van de Boltzmann-verdeling voor een bepaalde temperatuur geeft **op de x-as de snelheid (en dus KE) weer waarmee het grootste aantal moleculen (aantal getoond op y-as) bewegen bij die temperatuur**. De verdeling is asymmetrisch waardoor de gemiddelde snelheid  $v_{\text{gem}}$  (Figuur 3.14A, lichtgrijze stippellijn) (of corresponderende gemiddelde kinetische energie  $KE_{\text{gem}}$ , Figuur 3.14B,C) een waarde heeft die iets hoger is dan het maximum van de curve.

Merk op dat als de temperatuur van stikstofgas stijgt van 0 naar 100 °C, nagenoeg alle moleculen meer kinetische energie en meer snelheid krijgen (concept 3, Fig. 3.14A): De verdeling van snelheden behoudt een analoge asymmetrische vorm maar **verschuift naar hogere** waarden (naar rechts) bij 100°C (hogere temperatuur) en bijgevolg stijgt ook de gemiddelde snelheid (en gemiddelde kinetische energie).

Figuur 3.14B,C toont hoe we deze grafieken 'lezen':

- Ieder **punt op de curve** geeft aan hoeveel deeltjes in de populatie een bepaalde KE-waarde bezitten.
- Het **oppervlak van een bepaalde segment onder de curve** (bijv. met kinetische energie tussen  $KE_1$  en  $KE_2$  (Figuur 3.14B) of met kinetische energie groter dan  $KE_3$  (Figuur 3.14C)) is een maat voor het aantal moleculen die aan deze energievoorwaarden voldoen<sup>31</sup>.



### 3.3.2.3 Aggregatietoestanden van de materie: beschrijving volgens de kinetisch moleculaire theorie

Met behulp van de concepten van kinetische moleculaire theorie kan men de verschillende aggregatietoestanden beschrijven vanuit de eigenschappen en het gedrag van de deeltjes.

De twee bepalende factoren zijn:



<b>1</b>	<b>Kinetische energie van de deeltjes</b>	Dit wordt bepaald door de <b>temperatuur T</b>	<i>omgevingsfactor</i>
<b>2</b>	<b>De onderlinge aantrekking tussen de deeltjes (IMK)</b>	De sterkte van aantrekking wordt bepaald door het <b>polair karakter</b> en/of <b>polariseerbaarheid</b> van de deeltjes	<i>eigenschap van deeltjes</i>

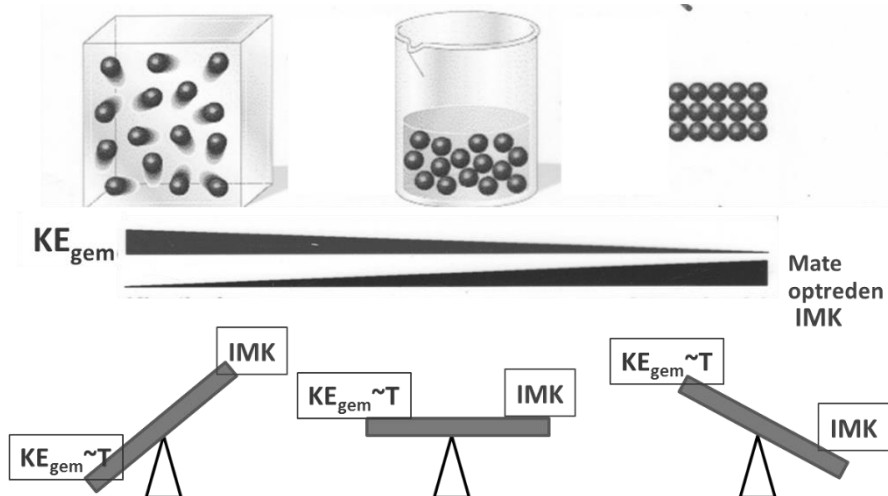
Aangezien de aantrekking tussen deeltjes zich slechts manifesteert wanneer deze voldoende lange tijd op voldoende kleine afstand van elkaar aanwezig zijn en aangezien de kinetische energie aan de deeltjes de mogelijkheid geeft om te vibreren, te roteren en weg te bewegen, is het duidelijk dat deze twee bepalende factoren een tegengestelde werking hebben. Algemeen kan men stellen:

De **aggregatietoestand** waarin een chemische verbinding zich bevindt **bij een bepaalde temperatuur en bepaalde druk** wordt bepaald door de **BALANS tussen de kinetische energie KE** van de individuele deeltjes bij die temperatuur (of de  $KE_{\text{gem}}$  van de populatie) **EN de sterkte van de optredende intermoleculaire krachten (IMK)** tussen de deeltjes.



<sup>31</sup> Het **totale oppervlak** onder curve is een maat voor alle bewegende deeltjes en is dus **constant**. Hierdoor ligt het maximum lager bij de temperatuurstijging getoond in Fig 3.14A: immers de verdeling is breder bij 100°C (meer verschillende en hogere snelheden) en dus liggen alle y-waarden lager (lager aantal deeltjes bij elk van de snelheden (x-waarde), maar breder bereik voor x).

Figuur 3.15 toont voor een verbinding die bij een bepaalde temperatuur een gas is (links) een vloeistof (midden) of een vaste stof (rechts), hoe dit evenwicht (balans) tussen KE en IMK is. M.a.w. de figuur



toont welke van beide factoren 'domineert' in elke toestand en naar welke factor KE of IMK de balans 'doorslaat' in elk van deze aggregatietoestanden.

Figuur 3.15

Voor een gas (links) domineert  $KE_{gem}$  over IMK; voor een vloeistof (midden) zijn deze factoren in balans; voor een vaste stof (rechts) domineren de IMKs.  $KE_{gem}$  wordt enkel bepaald door de temperatuur.

Dit is ook hieronder geformuleerd:

- In een chemische verbinding die bij een bepaalde temperatuur een **gas** is, bezitten de deeltjes bij deze temperatuur reeds **voldoende kinetische energie om intermoleculaire aantrekkingskrachten niet (of nauwelijks) mogelijk te maken**: IMK is volledig 'overwonnen', KE is 'dominant' (Figuur 3.15 links). Het ontbreken van de onderlinge aantrekkingskrachten tussen de gasmoleculen laat expansie toe.

*Wanneer de gasvormige aggregatietoestand reeds optreedt bij kamertemperatuur voor een bepaalde verbinding wijst dit erop dat het type IMK waarmee de deeltjes van deze verbinding elkaar zouden kunnen aantrekken zwak is. De betrokken moleculen zullen dus weinig polair of weinig polariseerbaar zijn.*



- In een chemische verbinding die bij een bepaalde temperatuur **vloeibaar** is, zijn de **intermoleculaire krachten voldoende sterk t.o.v. van de kinetische energie van de deeltjes bij die temperatuur, om de moleculen dicht bij elkaar te houden**. Bij die bepaalde temperatuur zijn de intermoleculaire aantrekkingskrachten tussen de deeltjes wel niet sterk genoeg om naburige moleculen in een gefixeerde ruimtelijke positie te houden. De moleculen zijn op een dynamische wijze in contact, ze kunnen vrij langs en over elkaar 'glijden' of 'vloeien'.
- In een chemische verbinding die **vast** is bij een bepaalde temperatuur zijn de IMK tussen naburige moleculen sterk genoeg om deze in een gefixeerde positie te houden. **De kinetische energie die de deeltjes gemiddeld hebben bij de gegeven temperatuur is niet voldoende om de intermoleculaire aantrekkingskrachten te overwinnen**. De moleculen vertonen enkel vibratie-energie (de moleculen vibreren rond hun plaats in het kristalrooster van de vaste stof); ze vibreren dus rond een punt dat in de ruimte vastligt relatief ten opzichte van hun nabuurmoleculen.

*Indien een verbinding vast is bij kamertemperatuur, kan je aanemen dat het intrinsiek sterke IMKs vormt als gevolg van een sterke polariteit (of mogelijk hoge polariseerbaarheid) van de deeltjes van de verbinding.*



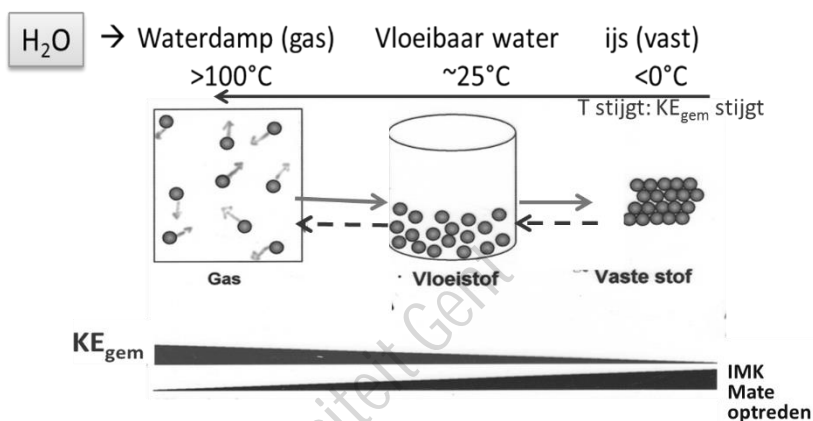


Op basis hiervan kan je verklaren waarom de suikerverbinding glucose (figuur 3.12F) een vaste stof is bij kamertemperatuur terwijl chloorgas bij deze zelfde temperatuur in gasvormige toestand is.

opgave in § 3.4

Voor één bepaalde chemische verbinding zullen veranderingen in temperatuur (en druk) de balans tussen KE/IMK en dus de aggregatietoestand beïnvloeden. Immers hogere temperatuur levert hogere gemiddelde kinetische energie. Anderzijds is het intuïtief duidelijk dat **verhoogde druk** de moleculen dichter bij elkaar brengt zodat de zwakke aantrekkingskrachten efficiënter werkzaam kunnen zijn.

**Figuur 3.16** toont de verandering in de balans IMK/KE die optreden wanneer één bepaalde verbinding (voorbeeld: water) vanuit gasvormige toestand wordt afgekoeld of samengedrukt (van links naar rechts, volle lichtgrijze pijlen) of vanuit vaste toestand wordt opgewarmd of bij lagere druk wordt gebracht (van rechts naar links, pijlen in streeplijn).



Figuur 3.16

In § 3.3.3 tot 3.3.5 worden specifieke eigenschappen van de verschillende aggregatietoestanden besproken.

### 3.3.3 Gassen



*Gassen en gasmengsels bepalen ons functioneren. Wij zijn bijvoorbeeld volledig afhankelijk van de samenstelling van het gasmengsel 'lucht' dat we continu inademen. Lucht bevat onder normale omstandigheden 20,9 % (volumepercent) zuurstofgas.*

Wetenschappers van de 17<sup>de</sup> tot begin 19<sup>de</sup> eeuw legden het gedrag van gassen in een aantal wetten vast gebaseerd op experimenten waarin meetbare macroscopische eigenschappen van de gassen werden bepaald. De combinatie van deze wetten leverde een universele relatie tussen de voornaamste variabelen waarmee het gedrag van gassen nagenoeg steeds correct kon voorspeld worden. Deze variabelen zijn **druk, volume, hoeveelheid materie en temperatuur**.

Soms, bij uitzondering, klopten de voorspellingen op basis van de gaswetten echter niet of niet voldoende. Als gevolg hiervan voerde men het begrip '**ideaal gas**' in. Het is een hypothetisch gas dat onder alle omstandigheden de afgeleide gaswetten volgt. De exacte definitie van een dergelijk 'ideaal gas' laat toe de vastgestelde uitzonderingen in reële gassen te omschrijven.

De later ontwikkelde **kinetisch moleculaire theorie (KMT) van de gassen** verklaart op basis van de mechanica en thermodynamica, dus vertrekkend van de bewegings- en energie-eigenschappen van de moleculen of atomen zelf, de macroscopische eigenschappen van een ideaal gas en van reële gassen.

In wat volgt vertrekken we bij de aangepaste KMT voor gassen (§3.3.3.1) en het concept 'ideaal gas' vanuit KMT-standpunt. We beschrijven de vier meetbare eigenschappen van een gas (§3.3.3.2) en leiden af wat hun relatie is (de universele gaswet, §3.3.3.3). Reeël gasgedrag komt in §3.3.3.4 aan bod.

#### 3.3.3.1 Kinetisch moleculaire theorie (KMT) voor gassen - ideaal gas

De vier concepten die de basis vormen voor de KMT (§3.3.2) gelden uiteraard ook voor gassen. Echter door de relatief grote verschillen tussen de gasfase en de gecondenseerde fasen, kunnen voor gassen additionele veronderstellingen worden gemaakt. Deze veronderstellingen zijn soms enkel geldig voor een 'ideaal gas'. Dit is een hypothetisch gas waarvan het gedrag dit van reële gassen voldoende benadert (zeker onder de gangbare condities van druk en temperatuur) om als vertrekbasis te worden genomen ter verklaring van de eigenschappen van reële gassen.

§ 3.3.2.1



#### Aangepaste KMT voor gassen:

Voor een gas wordt aangenomen dat de aanwezige deeltjes wel een welbepaalde massa hebben maar dat hun **volume verwaarloosbaar** is ten opzichte van het totaal volume waarin het gas zich bevindt (bv. volume van container). De veronderstelling van verwaarloosbaar volume steunt op het feit dat de gasdeeltjes zich gemiddeld op enorm grote afstand van elkaar bevinden: een gas is voornamelijk lege ruimte. Voor een ideaal gas wordt zelfs aangenomen dat het volume van de deeltjes 0 is.

Gasdeeltjes zijn bij uitstek constant **in beweging** (concept 2). Deze beweging is willekeurig en men neemt aan dat deze volgens rechte lijnen verloopt (wegens de grote onderlinge afstand tussen de deeltjes). De gasdeeltjes botsen met elkaar en met de wanden van de container waarin ze zich bevinden.

Ter illustratie een zuurstofgasmolecule beweegt bij een kamertemperatuur met een snelheid van ongeveer 500 m/s of 1600 km/u en botst meer dan 7 miljard maal per seconde.

**Intermoleculaire aantrekkingskrachten (IMK)** tussen de gasdeeltjes zijn onbestaande of **verwaarloosbaar** (aangepast concept 4). De sterk bewegende gasdeeltjes ondervinden geen (of verwaarloosbare) onderlinge aantrekking en worden ook niet aangetrokken door de moleculen van de containerwand. In een ideaal gas wordt zelfs aangenomen dat intermoleculaire krachten helemaal niet optreden, hoe laag de temperatuur (dus de kinetische energie) ook wordt.

Net als in de algemene KMT is de gemiddelde kinetische energie van een populatie van gasdeeltjes **rechtevenredig met de absolute temperatuur in Kelvin (K)** (concept 3). Binnen de populatie is er uiteraard eveneens een verdeling van de kinetische energie (volgens Boltzmann-verdeling).



§ 3.3.2.2

### 3.3.3.2 Vier meetbare eigenschappen definiëren een gas

Een gas wordt gekarakteriseerd door:

- Hoeveelheid/aantal deeltjes, symbool  $n$  (uitgedrukt in de eenheid: mol)
- Druk, symbool  $P$  (eenheid: zie lager)
- Volume, symbool  $V$  (eenheid liter of  $m^3$ )
- Temperatuur, symbool  $T$  (uitgedrukt in K)

De aard van de gasdeeltjes ( $O_2$  of  $Cl_2$  of butaanmoleculen bijv.) is in een ideaal gas onbelangrijk (§ 3.3.3.1): immers volgens de aangepaste KMT, houden we geen rekening met het volume van de gasdeeltjes en we gaan er ook van uit dat ze elkaar nooit aantrekken (dus verschillen in polariteit en sterkte van de intermoleculaire aantrekkingskracht (IMK) spelen geen rol). In realiteit dient men onder sommige omstandigheden hier wel mee rekening te houden (zie § 3.3.3.4)

We gaan eerst kort in op de eigenschap gasdruk  $P$  en op de eenheid van hoeveelheid materie: mol.

1. Elk gas oefent een meetbare druk uit op zijn omgeving. **Gasdruk  $P$**  wordt gedefinieerd als de kracht uitgeoefend door de gasdeeltjes per eenheid van oppervlak van de materie waarmee het gas in contact staat.



*Voorbeelden: Als je je fietsband oppompt ontstaat een hogere gasdruk in de band; Een ballon neemt zijn vorm aan doordat het gas binnenin een gasdruk (kracht per eenheid van oppervlak) uitoefent op de ballonwand. De atmosfeer drukt op de aarde (de atmosfeerdeeltjes oefenen een kracht uit per oppervlakte-eenheid);*

*(In het geval van de atmosferische druk is de kracht de zwaartekracht uitgeoefend per  $m^2$ . De zwaartekracht wordt uitgedrukt als het gewicht ( $m \times g$ ) van een luchtkolom met basis  $1 m^2$  ( $m$  is de massa van de luchtkolom;  $g$  is de valversnelling  $g$  ( $9,81 m/s^2$ ), de versnelling waarmee voorwerpen naar de aarde vallen als enkel de zwaartekracht er op inwerkt.)*



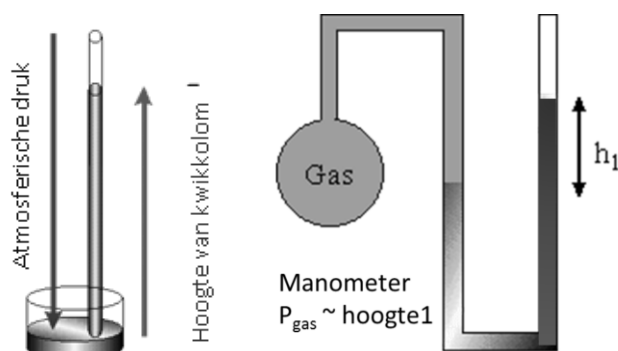
TIP

Op aarde is op **zeeniveau de atmosferische druk gemiddeld 1 atm**. Vandaar dat atm als eenheid van druk wordt gehanteerd.

Tabel 3.3 toont de voornaamste **drukeenheden** (met Pascal de SI-eenheid) en hoe die zich verhouden tot de nog veelgebruikte eenheid voor druk: atm.

Figuur 3.17 toont hoe atmosferische druk gemeten kan worden en hoe de druk van een gas in een gesloten container met een manometer wordt bepaald.

Tabel 3.3		
Eenheid	Symbool	1 atm is
millimeter Hg (kwik)	mm Hg	760 mm Hg
Pond 'per square inch'	PSI	14,7 PSI
torr	torr	760 torr
<b>Pascal</b>	<b>Pa</b>	<b>101325 Pa</b>
atmosfeer	atm	1 atm



Figuur 3.17: (links) Torricelli-barometer. Een gesloten buis wordt in een vat met kwik omgedraaid. De hoogte van de kwikkolom in de buis is een maat voor de druk uitgeoefend door de lucht/atmosfeer op het oppervlak van het kwik in het bad. Op zeeniveau met gasdruk = 1 atm en is de hoogte van de kwikkolom = 760 mm of 76 cm Hg.

(rechts) Opbouw van een manometer. In de U-vormige buis die is aangesloten op de container waarin het gas aanwezig is, zit een vloeistof (donkergrijsgekleurd). Het hoogteverschil  $h_1$  tussen de vloeistofniveaus in beide armen is een maat voor de gasdruk.

De druk die een gas in een gesloten container per oppervlakte-eenheid op de wanden uitoefent, kan vanuit de **kinetische moleculaire theorie** als volgt begrepen worden:

De **gasdruk** is de **kracht per oppervlakte-eenheid** veroorzaakt door de botsingen van de bewegende gasdeeltjes met de wand van de container.

Hoe hoger de temperatuur, hoe sneller de deeltjes bewegen en hoe meer kinetische energie ze gemiddeld bezitten, hoe groter hun impact (dus de kracht) zal zijn bij botsing en hoe vaker ze zullen botsen met de wand van de container en bijgevolg hoe hoger de gasdruk.



2. De **hoeveelheid materie  $n$**  is een meetbare eigenschap van chemische stoffen en dit wordt algemeen uitgedrukt met het symbool  $n$ . De SI-eenheid van hoeveelheid materie is de 'mol'.

**$n$  = het aantal mol.**

Per conventie is één mol is een hoeveelheid van een stof die evenveel specifieke eenheden bevat als er deeltjes zijn in 12,000 g  $^{12}\text{C}$ .

Dit aantal is experimenteel bepaald en gelijk aan:

**$N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$**  deeltjes en  $N_A$  wordt het **getal van Avogadro** genoemd.

Bijv. 1 mol  $\text{H}_2$  (waterstofgas) bevat  $6,022 \cdot 10^{23}$   $\text{H}_2$ -moleculen

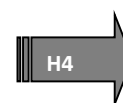
Stel: een bepaalde hoeveelheid gas bevat  $N$  gasdeeltjes. Dit komt overeen met een aantal mol volgens

:

$$n = N/N_A$$

of: het aantal mol is het totaal aantal deeltjes  $N$  gedeeld door het aantal deeltjes per mol ( $N_A$ )

Vooruitblik: één mol van een bepaalde verbinding heeft ook een welbepaald massa.



### 3.3.3.3 De universele gaswet

De relatie tussen de vier meetbare eigenschappen van een gas is reeds eeuwen bestudeerd. Bekende wetenschappers uit 16-19<sup>de</sup> eeuw zoals R. Boyle, J. Charles, J. Gay-Lussac, A. Avogadro hebben door telkens twee eigenschappen constant te houden, de **gaswetten** afgeleid:

- **druk-volume relatie** (bij  $n$  constant,  $T$  constant) :  $P \sim 1/V$  of  $PV = k$  of  $P_1V_1 = P_2V_2$   
*Het volume  $V$  van een vaste hoeveelheid gas ( $n$  mol) bij een constante temperatuur  $T$  is omgekeerd evenredig met de druk  $P$ . (' $k$ ' staat voor een constante): Hoe groter  $V$ , hoe kleiner de gasdruk.*
- **volume-temperatuur relatie** (bij  $n$  constant, druk constant):  $V \sim T$  of  $V = k'T$  of  $V_1/T_1 = V_2/T_2$   
*Het volume  $V$  van een vaste hoeveelheid gas ( $n$  mol) bij een constante druk  $P$  is rechtvenredig met de temperatuur  $T$ . ( $k'$ = constante)*
- **druk -temperatuur relatie** (bij constant,  $V$  constant):  $P \sim T$  of  $P = kT$  of  $P_1/T_1 = P_2/T_2$   
*De druk  $P$  van een vaste hoeveelheid gas ( $n$  mol) bij een constant volume  $V$  is rechtvenredig met de temperatuur  $T$ . ( $k$ = constante)*
- **volume - hoeveelheid relatie** (bij  $P$  constant,  $T$  constant):  $V \sim n$  of  $V = k''n$  of  $n_1/V_1 = n_2/V_2$   
*Het volume  $V$  van een gas bij constante druk  $P$  en constante temperatuur  $T$  wordt enkel bepaald door het aantal deeltjes (of het aantal mol  $n$ ) van het gas. Gelijke volumes van verschillende gassen bij dezelfde druk en temperatuur bevatten bijgevolg een zelfde aantal mol  $n$  en een zelfde aantal deeltjes (moleculen).  
 Deze wet kan ook als volgt geschreven worden:  $V = k'' N/N_A$  met  $N$ , totaal aantal gasdeeltjes,  $N_A$  getal van Avogadro. ( $k''$ = constante)*

De combinatie van deze experimentele wetten leidt tot de **ideale of gecombineerde of universele gaswet** met  $R$  de universele gasconstante die de drie constanten  $k$ ,  $k'$  en  $k''$  combineert.

$$PV = k$$

$$V = k'T$$

$$V = k''n$$

$$PV = nRT$$

De universele gaswet levert een mathematische relatie op van de vier eigenschappen van een gas en laat toe een gas volledig te beschrijven zolang het zich 'ideaal' gedraagt (zie §3.3.3.1).



Universele gasconstante R	
eenheden	waarde
liter atm/mol K	0,08206
Pa m <sup>3</sup> /mol K	8,314

De temperatuur  $T$  wordt uitgedrukt in **Kelvin**.

De waarde van de **universele gasconstante R** is experimenteel bepaald en hangt af van de eenheden waarin druk (in Pa, in atm en volume (m<sup>3</sup> of liter) worden uitgedrukt (zie tabel).

- Men gebruikt de ideale gaswet  $PV=nRT$  om van één (ideaal) gas onder één bepaalde conditie één onbekende eigenschap te bepalen. Bv. druk, volume en aantal mol van een gas zijn gekend, de temperatuur kan worden afgeleid.



Voorbeeld: 2 mol zuurstofgas is aanwezig in een container van 22,4 liter bij een temperatuur  $T$  van 0 °C. De gasdruk kan als volgt bepaald worden:

Gegevens:	$P = nRT/V$
$n = 2,00$ mol	$P = [2,00 \text{ mol} (0,08206 \text{ liter atm/mol K}) 273 \text{ K}] / 22,4 \text{ liter}$
$V = 22,4$ liter	$= 2,00 \text{ atm}$
<b><math>T = (0,0 + 273) \text{ K} = 273 \text{ K}</math></b>	
$R = 0,08206 \text{ l atm/mol K}$	

- Indien een ideaal gas dat  $n$  mol gasdeeltjes bevat en een volume  $V_1$ , druk  $P_1$  en temperatuur  $T_1$  heeft, naar andere condities ( $V_2, P_2, T_2$ ) wordt gebracht is:

$$n = P_1 V_1 / T_1 \text{ en } n = P_2 V_2 / T_2 \text{ en dus: } P_1 V_1 / T_1 = P_2 V_2 / T_2$$

Men gebruikt de ideale gaswet onder deze vorm wanneer het gaat om het bepalen van één onbekende eigenschap van een bepaalde hoeveelheid van een ideaal gas (dus  $n = \text{constant}$ ) die een beschreven verandering in condities ondergaat. Bijvoorbeeld men kent druk en temperatuur bij beide condities en het startvolume  $V_1$  van het gas: de volumewijziging en dus  $V_2$  kan berekend worden.

- $P_1 V_1 / T_1 = P_2 V_2 / T_2$  kan vereenvoudigd worden wanneer ofwel de druk, de temperatuur of het volume constant blijven bij de verandering. De individuele gaswetten zijn dan geldig (zie hoger).



Voor druk en temperatuur zijn **twee standaardwaarden of referentiewaarden** gedefinieerd:

druk  $P = 1 \text{ atm}$  (atmosferische druk op zeeniveau)  
 temperatuur van 273 K (of 0 °C)

Bij deze condities is het gas bij **STP-condities**: standaardcondities van temperatuur en druk  $P$ . Volgens de universele gaswet en relatie tussen volume en hoeveelheid stof  $n$  is bij STP condities één mol (dus  $N_A$  deeltjes) van om het even welk ideaal gas steeds 22,4 liter (zie experimentele evidentie in Tabel 3.4). Dit volume wordt het **molair volume** (volume van één mol) genoemd en dit is onafhankelijk van de massa of aard van de gasdeeltjes.

$$V = nRT/P = (1 \text{ mol } 0,08206 \text{ liter atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1} 273 \text{ K}) / 1 \text{ atm} = \mathbf{22,4 \text{ liter}}$$

gas	Molair volume (in liter)	Massa van 1 mol (in g)
Helium (He)	22,398	4
Argon (Ar)	22,401	20
Waterstof (H <sub>2</sub> )	22,410	2
Stikstof (N <sub>2</sub> )	22,413	28
Zuurstof (O <sub>2</sub> )	22,414	32
Koolstofdioxide (CO <sub>2</sub> )	22,414	44

De verbindingen in Tabel 3.4 hebben een verschillende massa en dus een ander volume. In een gas dat zich ideaal gedraagt heeft dit echter geen effect op het molair gasvolume. Immers vanuit KMT-oogpunt is voor een ideaal gas het volume van de gasdeeltjes verwaarloosbaar. Het feit dat een gelijk aantal mol van om het even welk gas een gelijk volume inneemt (**volume –hoeveelheid stof relatie**) volgt uit het feit dat

in een ideaal gas de afstand tussen de gasdeeltjes groot is én onderlinge aantrekking niet optreedt: Deeltjes in het (ideaal) gas 'leiden a.h.w. een onafhankelijk bestaan'. Zie ook: [http://preparatorychemistry.com/Bishop\\_Avogadros\\_Law\\_Flash1.htm](http://preparatorychemistry.com/Bishop_Avogadros_Law_Flash1.htm)

Op analoge wijze kunnen de overige gaswetten eveneens vanuit de kinetisch moleculaire gastheorie kwalitatief verklaard worden (Tabel 3.5).



Tabel 3.5		
Relatie		KMT verklaring + link
<b>volume-temperatuur relatie</b>  V~T	constant P en n	Wanneer een gas wordt opgewarmd, zullen de deeltjes gemiddeld meer kinetische energie verkrijgen en dus sneller bewegen en harder botsen met de wand van de container. Wanneer het volume (dus ook het oppervlak) niet zou veranderen, betekent dit dat meer botsingen zouden optreden per oppervlakte eenheid en dus dat de druk van het gas zou stijgen. De temperatuur van een gas verhogen zonder dat zijn druk stijgt, is enkel mogelijk door het volume evenredig met de temperatuur te laten toenemen waardoor het aantal botsingen per oppervlakte-eenheid onveranderd kan blijven.  <a href="http://preparatorychemistry.com/Bishop_Charles_Law_Flash1.htm">http://preparatorychemistry.com/Bishop_Charles_Law_Flash1.htm</a>
<b>druk-volume-relatie</b>  P~1/V	constant T & n	Als het volume van de container kleiner wordt gemaakt, wordt ook het totale oppervlakte van de wanden waarmee de deeltjes kunnen botsen, kleiner. Bijgevolg zullen (nadat het volume verkleind is) meer botsingen gebeuren per oppervlakte-eenheid. Bovendien dienen de deeltjes tevens kortere afstanden af te leggen om op de wanden te botsen. Door de volumedaling is dus het aantal botsingen/oppervlakte-eenheid toegenomen en bijgevolg stijgt de gasdruk.  <a href="http://preparatorychemistry.com/Bishop_Boyles_Law_Flash1.htm">http://preparatorychemistry.com/Bishop_Boyles_Law_Flash1.htm</a>
<b>druk-temperatuur relatie</b>  P~T	constant V & n	Bij verhoging van de temperatuur van een gas zal de kinetische energie van de deeltjes gemiddeld toenemen. Wanneer dit gas zich in een rigide (onvervormbare) container bevindt (dus het volume van de container kan niet wijzigen), neemt het totaal aantal botsingen met de wand en per oppervlakte-eenheid toe (en hun impact neemt toe). Bijgevolg stijgt de druk.  <a href="http://preparatorychemistry.com/Bishop_Gay_Lussac_Law_Flash1.htm">http://preparatorychemistry.com/Bishop_Gay_Lussac_Law_Flash1.htm</a>

De meeste gassen rondom ons zijn gasmengsels en bevatten dus meerdere chemische verbindingen. Voor een **ideaal gasmengsel** geldt de **Wet van Dalton** (John Dalton , 1766-1844) of de **wet van partieldrukken**:

De totale druk **P** uitgeoefend door een gasmengsel in één container (dus met vast volume **V**) bij welbepaalde temperatuur **T** is de **som van de partieldrukken**  $P_1, P_2, \dots$  die elk gas zou uitoefenen wanneer het afzonderlijk in diezelfde container bij dezelfde temperatuur zou aanwezig zijn.

$$P = P_1 + P_2 + P_3 + \dots$$

Vanuit kinetisch moleculair oogpunt is deze experimentele vaststelling logisch. Als, zoals in de KMT wordt aangenomen, gasmoleculen in een ideaal gasmengsel in constante willekeurige beweging zijn en op elkaar geen aantrekkingskrachten (geen IMK) oefenen uit behalve door botsing, zal het niet uitmaken of deze botsingen met dezelfde of verschillende moleculen gebeurt. Immers in één gasmengsel bij bepaalde druk en temperatuur bezitten alle moleculen gemiddeld dezelfde kinetische energie. De totale druk wordt enkel bepaald door het totaal aantal deeltjes.

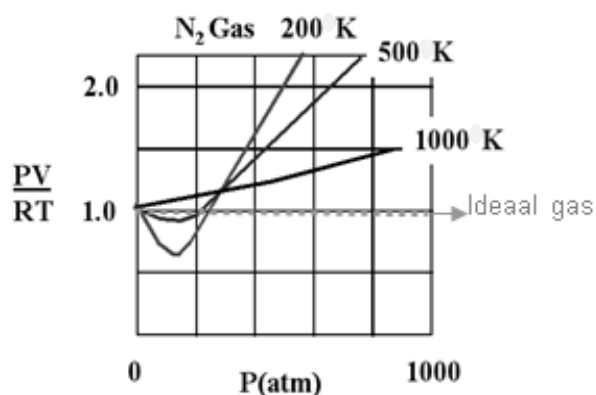
Dit kan ook uit de ideale gaswet worden afgeleid. Bij een temperatuur **T** hebben alle gassen in het mengsel dezelfde **T** en volume **V**.

$$P = P_1 + P_2 + \dots = n_1RT/V + n_2RT/V + \dots = (n_1+n_2 + \dots)RT/V = n_t RT/V$$

$n_t = n_1+n_2 + \dots$  is het totaal aantal mol

### 3.3.3.4 Reële gassen gedragen zich ideaal bij STP-condities

Voor 1 mol van een ideaal gas is volgens de ideale gaswet:  $PV/RT=n=1$ . Figuur 3.18 toont voor 1 mol van het reële gas  $N_2$  de waarde van  $PV/RT$  (in de y-as) in functie van de druk  $P$  (in de x-as) bij verschillende temperaturen  $T$  (200, 500 en 1000 K).



Hieruit blijkt dat  $N_2$ -gas onder bepaalde condities van druk en temperatuur duidelijk **afwijkt** van een ideaal gas.

Figuur 3.18:  $PV/RT$  voor één mol  $N_2$ -gas bij verschillende temperaturen in functie van de druk  $P$ . Voor 1 mol van een ideaal gas (dus  $n=1$ ) is  $PV/RT$  bij elke druk = 1.

Algemeen geldt echter: **Bij atmosferische druk ( $P=1$  atm) en bij kamertemperatuur ( $25^\circ\text{C}$ ,  $298$  K) gedragen reële gassen zich (vrij) ideaal.**

Onder deze condities kan men de universele gaswet gebruiken.

De afwijkingen in Figuur 3.18 treden op omdat onder condities van hoge druk en/of lage temperatuur gaan twee veronderstellingen, die verondersteld worden voor een ideaal gas (§3.3.3.1), niet meer op voor reële gassen.

*Voor een ideaal gas geldt immers dat het volume van de gasdeeltjes 0 is en dat de gasdeeltjes elkaar helemaal niet aantrekken.*

*In reële gassen hebben de deeltjes wel een **volume** en nemen de deeltjes dus een deel van de ruimte in waarin de gasmoleculen bewegen. Het voor beweging beschikbare volume in de container waarin het gas zich bevindt is dus **kleiner** en dit wordt best merkbaar bij hoge druk.*

*Bij voldoende dicht naderen van de moleculen (door hoge druk of door lage temperatuur) kunnen de moleculen van een reël gas wel **elkaar aantrekken**.*

*Als gevolg van deze verschillen wordt de waarde voor  $PV/RT$  voor 1 mol van een reël gas, naargelang de condities van druk en temperatuur, groter of kleiner dan 1<sup>32</sup>.*

Om het gedrag van reële gassen onder alle condities te voorspellen werd door J. van der Waals in 1873 een vergelijking opgesteld die een aanpassing vormt van de ideale gaswet en waarin correctie-termen zijn opgenomen voor reële gasgedrag.



<sup>32</sup> Meer gedetailleerde uitleg ter info:

$PV/RT$  wordt  $> 1$  bij hoge druk (Figuur 3.18): Bij hoge  $P$  is het volume van de moleculen van een reël gas niet meer verwaarloosbaar ten opzichte van het totale volume  $V$  waarin het gas zich bevindt. Bij hoge  $P$  komen de moleculen dichter bij elkaar. Bij een bepaalde druk is een reël gas niet meer samendrukbaar, terwijl een ideaal gas per definitie oneindig samendrukbaar is. Onder deze condities is het volume  $V$  van het reël gas groter dan ideaal en de waarde van  $PV$  wordt groter dan in de ideale situatie.

$PV/RT$  wordt  $< 1$  bij lage temperatuur (Figuur 3.18): Bij lage temperatuur (lage gemiddelde kinetische energie) kunnen IMKs tussen de gasmoleculen optreden en deze onderlinge aantrekking verzwakt de impact van deeltjes op de wand van de container wanneer ze hiermee botsen. Hierdoor is de druk  $P$  van een reël gas lager dan ideaal en bijgevolg de  $PV/RT < 1$ .



van der Waals vergelijking:  $(P + n^2a / V^2) (V - nb) = nRT$

De termen '+  $n^2a / V^2$ ' en '- $nb$ ' leveren respectievelijk een correctie voor voor de reële druk en volume.

**a** en **b** worden de van der Waalscoëfficiënten genoemd. Deze dienen voor ieder gas experimenteel te worden gemeten.

*Uit tabel 3.7 blijkt dat deze coëfficiënten toenemen met stijgende massa en volume van de gasmoleculen (vergelijk bijv.  $H_2$  versus  $CCl_4$ ). Het verschil in de waarde voor  $a$  voor bijv. zuurstofgas en waterdamp gaat terug op het verschil in polariteit tussen deze twee moleculen en zal voor het meer polaire water resulteren in een grotere correctie van de IMK en dus de druk.*

gas	$a$ (l <sup>2</sup> atm/mol <sup>2</sup> )	$b$ (l/mol)
He	0,0341	0,0237
H <sub>2</sub>	0,244	0,0266
O <sub>2</sub>	1,36	0,0318
H <sub>2</sub> O	5,46	0,0305
CCl <sub>4</sub>	20,4	0,1383

Voorbeeld:

100 mol zuurstofgas is aanwezig in een container van 22,4 l bij 0 °C.

Volgens de universele gaswet is de druk in deze container 100 atm.

Gebruiken we de experimenteel bepaalde waarden voor  $a$  en  $b$  (tabel 3.7) en de van der Waalsvergelijking wordt een reële gasdruk van 89,5 atm afgeleid.

### 3.3.4 Vloeistoffen

#### 3.3.4.1 Inleiding

##### § 3.3.2.3

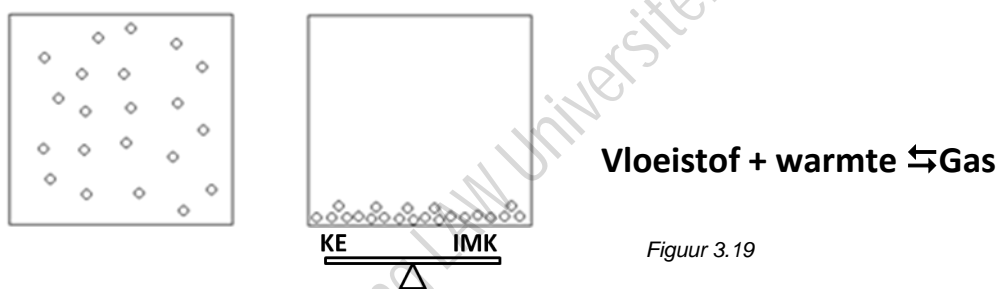
Vanuit de kinetisch moleculaire theorie werd de vloeibare aggregatietoestand van een verbinding bij een bepaalde temperatuur T beschreven als volgt:

In een vloeistof zijn de intermoleculaire aantrekkingen tussen de moleculen sterk genoeg om de moleculen dicht bij elkaar te houden. Deze intermoleculaire krachten treden dus in voldoende mate op (of 'zijn voldoende sterk') om de kinetische energie die de moleculen bij de temperatuur T bezitten in sterke mate tegen te werken.



De moleculen bewegen wel, maar ze bewegen niet van elkaar weg zoals in een gas (Figuur 3.15, Figuur 3.19, <http://www.chim.lu/vid/eau1.gif>): ze blijven continue in contact met hun nabuurmoleculen en 'rollen' als het ware over elkaar.

*Dit ligt aan de basis van de 'vloeibaarheid' van vloeistoffen, aan de basis van het feit dat ze een vast volume hebben maar geen vaste vorm en weinig samendrukbaar zijn. Twee andere typische eigenschappen (hier niet behandeld) van vloeistoffen die door intermoleculaire aantrekking verklaard kunnen worden zijn hun viscositeit of dikvloeibaarheid (bijv stroop) en het voorkomen van oppervlaktespanning.*



Figuur 3.19



De overgang van een verbinding in vloeibare vorm naar gasvormige toestand wordt **verdampen** genoemd. Dit is een proces waarbij een temperatuursverhoging vereist is. Dit kan door **warmte** toe te voegen, m.a.w. verdampen is een **endotherm proces**. (vergelijking in Figuur 3.19). De gasfase wordt ook de dampfase genoemd.

Warmte, toegevoegd aan een vloeistof, verleent de moleculen in de vloeistof gemiddeld **meer kinetische energie** zodat deze de intermoleculaire aantrekking (IMK) van nabuurmoleculen kunnen overwinnen en in gasfase overgaan (zie §3.3.4.2).

Het omgekeerde proces: de overgang van gas naar vloeistof noemt **condenseren** en hier komt warmte bij vrij (**exotherm proces**). (Figuur 3.19).

Anderzijds, door een verbinding in vloeibare vorm af te koelen wordt deze vast (zie verder § 3.3.5) (**condensatie, exotherm proces**)

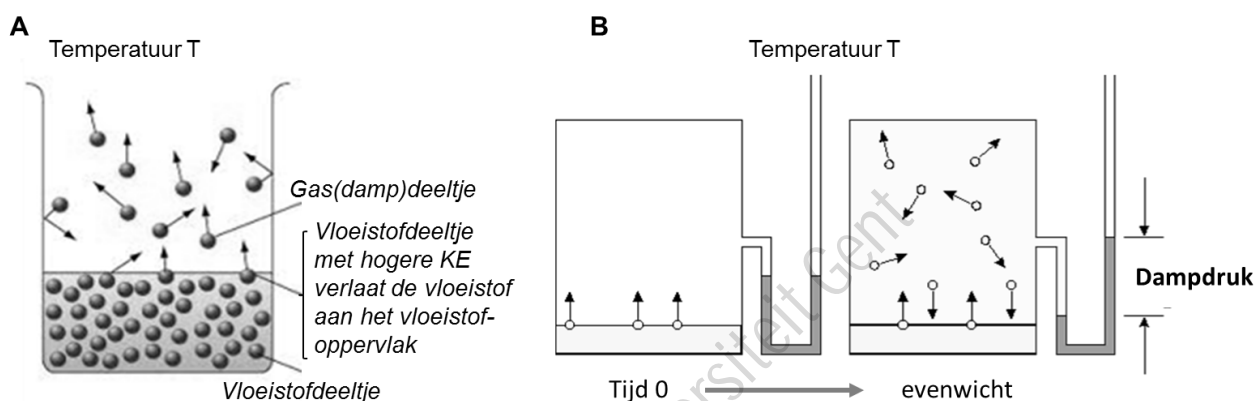
We beschrijven processen zoals verdampen, condenseren, maar ook koken vanuit de concepten van de kinetisch moleculaire theorie.

### 3.3.4.2 Het verdampingsproces en de dampdruk van een vloeistof.

We beschouwen twee experimentele opstellingen (Figuur 3.20).

Een open beker met een vloeistof bij kamertemperatuur. Na verloop van tijd is het vloeistofvolume in de beker gedaald.

Een vloeistof wordt op tijdstip 0 in een gesloten container gebracht bij een temperatuur  $T$ . Aan de container is een drukmeter (manometer) aangesloten. De gasdruk in de container loopt geleidelijk op en een evenwicht stelt zich na verloop van tijd in waarbij de gasdruk constant is en groter dan in de begintoestand.



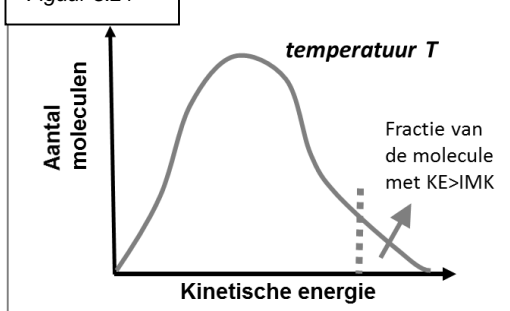
Figuur 3.20

Beide experimentele vaststellingen zijn een gevolg van het verdampen van de vloeistof en kunnen verklaard worden op basis van de kinetisch moleculaire theorie:

#### Kinetische moleculaire verklaring van het verdampingsproces:

In een vloeistof bij een bepaalde temperatuur hebben de moleculen gemiddeld een kinetische energie die voldoende laag is om de moleculen bij elkaar te houden als gevolg van intermoleculaire aantrekkingskrachten (IMK) tussen de vloeistofmoleculen. De kinetische energie van de vloeistofmoleculen is echter verdeeld over een breed bereik volgens de Boltzmannverdeling (zie § 3.3.2.2, Figuur 3.21).

Figuur 3.21



Een aanzienlijk deel van de vloeistofmoleculen bezit bijgevolg bij een temperatuur  $T$  een hogere kinetische energie dan de gemiddeld kinetische energie van de vloeistof.

Een fractie van deze vloeistofmoleculen met hogere kinetische energie (Figuur 3.21) bezit voldoende kinetische energie om de intermoleculaire aantrekkingskrachten van nabuurmoleculen te overwinnen. Dit treedt op wanneer

ze zich aan het **vloeistofoppervlak** bevinden (waar de intermoleculaire aantrekkingskrachten beperkter is). Deze **'hoogenergetische' moleculen 'ontsnappen' uit de vloeistof** en gaan over in gasfase overgaan. Dit is het proces van **verdampen** (Figuur 3.20 A,B).

Zoals getoond in Figuur 3.20B kan in een gesloten systeem de druk van het gas dat gevormd wordt door verdamping gemeten worden. Deze gasdruk wordt de dampdruk van de vloeistof genoemd.

De **dampdruk P** (ook **dampspanning** genoemd) van een vloeistof bij een temperatuur T is de druk uitgeoefend door de gasfase of dampfase die ontstaat door het ontsnappen van hoog energetische vloeistofmoleculen uit de vloeistof vanaf het oppervlak (dus door verdampen).



De dampdruk is een maat voor het doorgaan van de verdamping (dus voor het aantal deeltjes in de gas of dampfase) en levert informatie over de aard (polair karakter) van de vloeistof.

Hieronder worden **drie kenmerken** van de dampdruk uitgewerkt.



1. Bij een bepaalde temperatuur T is de dampdruk P van een bepaalde vloeistof constant.
2. De dampdruk van een bepaalde vloeistof stijgt met stijgende temperatuur
3. De dampdruk van een bepaalde vloeistof bij een bepaalde temperatuur T wordt bepaald door het polair karakter van de moleculen.




---

**1. De dampdruk P van een bepaalde vloeistof bij een bepaalde temperatuur is constant en wordt bepaald door een dynamisch evenwicht tussen vloeistof- en dampfase.**

---

Bij een temperatuur T bestaat voor elke verbinding in een gesloten systeem een **evenwicht** tussen de vloeibare fase en de dampfase of gasfase. Bij dit evenwicht, gekarakteriseerd door een welbepaalde verdeling van de moleculen over deze twee fasen, gaan per tijdseenheid evenveel vloeistofmoleculen naar de gasfase (verdamping) als er gasmoleculen in vloeistoffase terugkeren (condensatie).

Verdampen houdt in dat vloeistofmoleculen met voldoende kinetische energie aan het oppervlak door de plaatselijke intermoleculaire krachten niet in de vloeistof kunnen gehouden worden (zie KMT-verklaring op vorige pagina).

Hoe kan het omgekeerde proces van condensatie vanuit kinetisch molecuair oogpunt beschreven worden? De gasmoleculen in de dampfase boven het vloeistofoppervlak bewegen en botsen onderling en met de wand van de container. Als gevolg hiervan veranderen de botsende deeltjes van bewegingsrichting en in een aantal gevallen botsen ze op het vloeistofoppervlak. Ze kunnen dan weerhouden worden door de intermoleculaire krachten uitgeoefend door de vloeistofmoleculen waartegen ze botsen. Hierdoor dringen deze moleculen uit de gasfase de vloeistoffase opnieuw binnen (condensatie).

Een evenwicht stelt zich in als per tijdseenheid evenveel moleculen uit de vloeistof treden als erin terugkomen.

*Omdat bij dit evenwicht twee tegengestelde processen (hier verdampen en condensatie) met dezelfde snelheid doorgaan wordt dit een dynamisch evenwicht genoemd (voorgesteld met dubbele pijl in Figuur 3.19).*

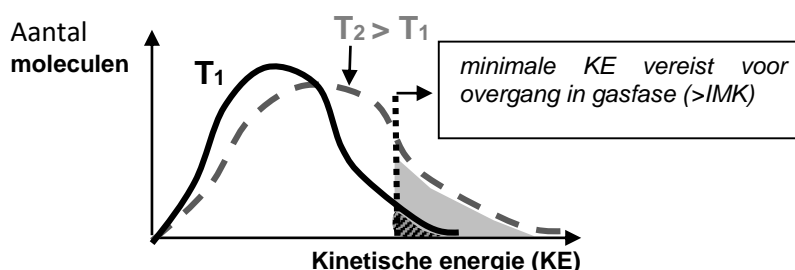
Bij het dynamisch evenwicht bij een temperatuur T is **de verhouding van het aantal moleculen in elk van de twee fasen op elk moment constant en dus de dampdruk P constant.**

Immers: Het aantal moleculen in gasfase bij evenwicht bepaalt de dampdruk.

## 2. De dampdruk van een bepaalde vloeistof stijgt met stijgende temperatuur



Figuur 3.22 toont dat bij een temperatuursverhoging van  $T_1$  naar  $T_2$  (en dus een overgang naar een hogere gemiddelde kinetische energie van de vloeistof) een grotere fractie van de vloeistofmoleculen (ingekleurde segment onder de curve) een kinetische energie bezit die voldoende is om de intermoleculaire krachten ter hoogte van het vloeistoppervlak te overwinnen en in gasfase over te gaan. Als gevolg daarvan zal de verdamping bij  $T_2$  sterker doorgaan dan bij  $T_1$  en is de dampdruk  $P$  hoger zijn bij  $T_2$ .



Figuur 3.22: Boltzmannverdeling van de kinetische energie voor de moleculen van een vloeistof bij temperatuur  $T_1$  (zwarte lijn) en een hogere temperatuur  $T_2$  (grijze streeplijn). De kinetische energie die minimaal nodig is om de intermoleculaire aantrekking te overwinnen (deze waarde zal variëren van molecule tot molecule) is aangeduid (verticale stippellijn). De gearceerde regio onder de curve bij  $T_1$  bevat het kleine deel van de moleculen die bij deze temperatuur voldoende kinetische energie bezitten om te verdampen (om IMK te overwinnen). Bij de hogere temperatuur  $T_2$  is de Boltzmannverdeling naar rechts verschoven (moleculen hebben gemiddeld een hogere kinetische energie). Het deel van de moleculen (grijsgekleurd + gearceerd) met voldoende kinetische energie om de IMK te overwinnen is groter bij  $T_2$ . De dampdruk zal als gevolg hiervan groter zijn bij  $T_2$ .

°C	Dampdruk in kPa
0,01	0,611
10	1,228
20	2,338
50	12,34
75	38,56
100	101,32 = 1 atm

Tabel 3.8 illustreert hoe de dampdruk van water stijgt met stijgende temperatuur (zie ook Figuur 3.23).

De verandering van de dampdruk van een bepaalde vloeistof bij een temperatuursverandering kan eveneens voorspeld worden op basis van het feit dat de dampdruk de gasdruk is na instelling van bovenbeschreven **dynamisch evenwicht**.

Zoals vermeld is dit evenwicht het resultaat van twee tegengestelde processen waarvan één (vloeistof naar gas, verdampen) warmte vereist (**endotherm** is) en het tweede (gas naar vloeistof, condensatie) warmte vrijstelt (**exotherm** is). Immers bij verdampen is warmte (omgezet in kinetische energie van de moleculen) nodig om de intermoleculaire aantrekking te overwinnen, bij condensatie gaan de moleculen over naar een toestand van lagere kinetische energie-inhoud.

Samengevat:

← **condensatie, exotherm**

**Vloeistof + warmte ⇌ damp**

→ **verdampen, endotherm**

**Verdampingswarmte** is de hoeveelheid warmte vereist om 1 g van een vloeistof in gasvorm om te zetten.

Wanneer aan dit systeem in dynamische evenwicht extra warmte wordt toegevoegd door de temperatuur te verhogen, wordt het evenwicht verstoord. De toegevoegde warmte zal worden verbruikt en meer vloeistof zal in gasfase overgaan (verdampen). Een nieuw evenwicht stelt zich vervolgens in waarbij de verdeling van het aantal moleculen tussen vloeistof- en gasfase gewijzigd is in het voordeel van de dampfase. Men zegt dat **het evenwicht is verschoven**. Het grotere aantal gasmoleculen resulteert in een hogere dampdruk  $P$ . We komen met deze redenering tot hetzelfde besluit als hoger: **Het verhogen van de temperatuur van een vloeistof (verwarmen) resulteert in een hogere dampdruk.**

Omgekeerd, het verlagen van de temperatuur van een vloeistof (onttrekken van warmte) resulteert in een lagere dampdruk. Immers, de omgekeerde reactie (condensatie) waarbij warmte wordt geproduceerd zal dan tijdelijk sneller doorgaan dan de verdamping, tot een nieuw dynamisch evenwicht zich instelt met minder moleculen in de gasfase.

Het verschuiven van het evenwicht als gevolg van een verandering in een systeem in dynamisch evenwicht wordt algemeen beschreven in het **'Principe van le Châtelier'** (Henri Le Châtelier, 1884):

*Een systeem in dynamisch evenwicht reageert op een 'stress' of verandering door deze stress tegen te werken. Van de twee gekoppelde reacties of processen die samen het dynamisch evenwicht vormen, wordt deze waarbij de aangebrachte stress wordt weggewerkt (bv warmteverbruik bij verhogen van de temperatuur) tijdelijk bevorderd tot een nieuw dynamisch evenwicht zich instelt.*

Dit principe is geldig voor alle fysische en chemische processen in dynamisch evenwicht.

### 3. De dampdruk van een vloeistof bij een bepaalde temperatuur wordt bepaald door het polair karakter van de moleculen.



Voorbeeld (zie ook Figuur 3.23)

Vergelijk:

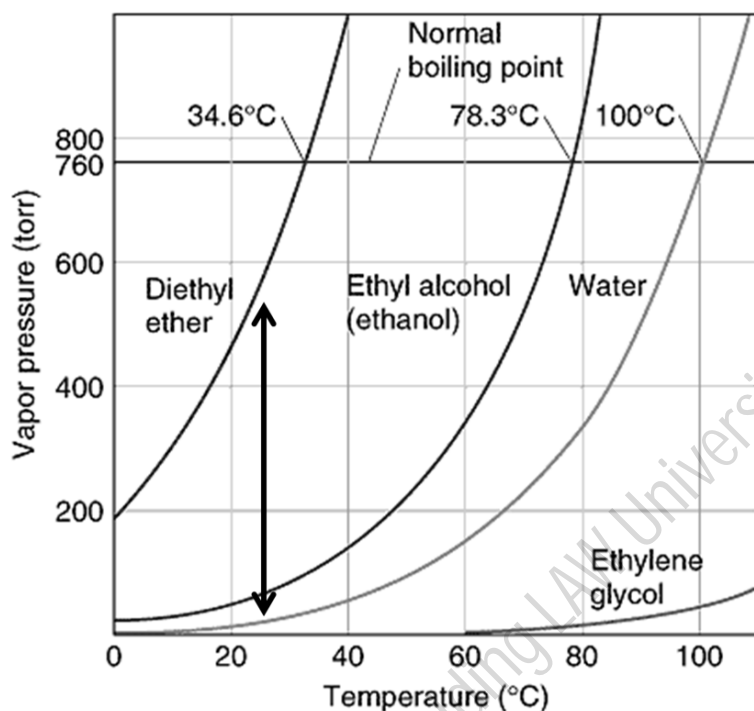
- ✓ **Water** ( $\text{H}_2\text{O}$ ) is een polaire molecule (nettodipoolmoment  $\mu_{\text{netto}} > 0$ ) (zie §2.6.4.2) en watermoleculen trekken elkaar aan via H-bruggen (§3.2.3). Gevolg: Water heeft bij  $25^\circ\text{C}$  een dampdruk van 24 mmHg.
- ✓ **Diethylether** ( $\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$  (structuur zie deel II) is minder polair en heeft slecht een kleine  $\mu_{\text{netto}}$ . Deze moleculen voldoen niet aan de voorwaarden om elkaar via H-bruggen aan te trekken (zie deel II): de moleculen trekken elkaar aan via de zwakkere dipool-dipoolkrachten. Gevolg: Diethylether heeft bij  $25^\circ\text{C}$  een dampdruk van 545 mmHg, d.i. aanzienlijk hoger dan deze van water.

Uit dit voorbeeld blijkt:



**Hoe zwakker de intermoleculaire aantrekkingen die tussen de moleculen van een verbinding kunnen optreden, hoe hoger de dampdruk is bij een welbepaalde temperatuur.**

Verklaring: Moleculen in verschillende verbindingen bij een bepaalde temperatuur T bezitten dezelfde gemiddelde kinetische energie (de Boltzmannverdeling is hetzelfde). In een verbinding waarin de aantrekkingen tussen de moleculen zwak zijn (door minder polaire karakter bijv. diethylether), is de minimale kinetische energie die een molecule aan het vloeistofoppervlak dient te bezitten om de aantrekking van de nabuurvloeistofmoleculen te overwinnen, lager dan in een verbinding met sterkere IMK (de grenswaarde met stippellijn aangeduid in Fig. 3.23 ligt dus meer naar links). **Bij een welbepaalde temperatuur zal bij de verbinding met minder sterke IMK bijgevolg een groter aandeel van de moleculen reeds deze minimale energie bezitten en zullen dus meer moleculen uit de vloeistof vrijgesteld worden.** De dampdruk van de minder polaire verbinding zal hoger zijn.



Anders uitgedrukt, verbindingen met zwakke intermoleculaire attracties zijn **vluchtiger** dan verbindingen waar sterkere aantrekkingskrachten tussen de moleculen optreden.

Dit is geïllustreerd voor een aantal chemische verbindingen in Figuur 3.23.

Figuur 3.23: Dampdruk (vapor pressure) in functie van de temperatuur is getoond voor vier verbindingen die verschillen in polair karakter. (rangschiikking volgens stijgende polariteit: diethylether < ethanol < water < ethyleenglycol). (Voor de structuurformules van de verbindingen zie Deel II).

Op de y-as is P in torr uitgedrukt: 760 torr = 760 mmHg = 1 atm

Bij 25°C is de dampdruk van diethylether hoger dan deze van water (pijl toont het verschil).

### 3.3.4.3 Koken - Kookpunt en Normaal Kookpunt

Het kookproces en het kookpunt van een vloeistof staan in nauw verband met het verdampingsproces en de dampdruk van de vloeistof.

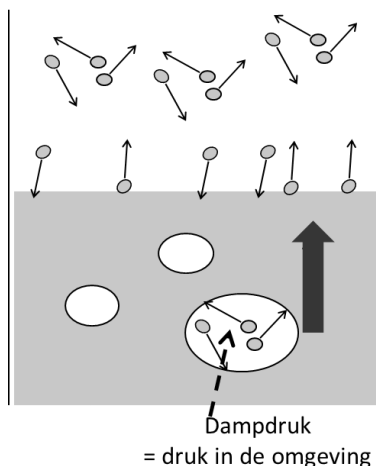


Het **KOOKPUNT** van een vloeistof is de temperatuur T van de vloeistof waarbij de dampdruk P gelijk is aan de omgevingsdruk

Figuur 3.24 illustreert waarin koken verschilt van verdampen.

Verdampen voltrekt zich enkel aan het vloeistofoppervlak terwijl bij het koken van een vloeistof ook vloeistofmoleculen middenin de vloeistof efficiënt aan de intermoleculaire aantrekking ontsnappen en in gasfase overgaan.

### Het kookproces



Figuur 3.24



Wanneer een vloeistof tot het kookpunt wordt opgewarmd, is de dampdruk gelijk aan de druk in de omgeving. Het gevolg hiervan is dat ook moleculen middenin de vloeistof die over voldoende kinetische energie beschikken, de intermoleculaire aantrekkingskrachten kunnen overwinnen en in gasfase kunnen overgaan. Dit leidt tot de vorming van gasbellen in de vloeistof die omwille van hun lagere dichtheid naar het vloeistofoppervlak opstijgen (' hoorbaar' proces: kloppen van een vloeistof bij koken).

Bij temperaturen lager dan het kookpunt - waarbij de druk in de omgeving hoger is dan de dampdruk van de vloeistof - worden dergelijke interne gasbellen (gevormd door in gasfase gaan van interne vloeistofmoleculen met voldoende kinetische energie) eveneens gevormd. Echter, deze klappen door de hogere externe druk onmiddellijk ineen.

Bij het kookpunt kunnen deze gasbellen (waarin de druk = dampdruk = externe druk) blijven bestaan, groter worden en naar het oppervlak opstijgen. Dit maakt koken een efficiënter proces dan verdampen.

Net als verdampen is koken een **endotherm** proces: energie is vereist om de intermoleculaire aantrekkingskrachten in de vloeistoffase te overwinnen. Om een vloeistof aan het koken te brengen, dient men die bijgevolg op te warmen. Bij het kookpunt ontstaat een dynamisch evenwicht waarbij de overgang van moleculen die naar de dampfase overgaan en eruit terugkeren even snel gebeurt. Door **warmte** te blijven toevoegen kan men het evenwicht volledig naar de gasfase verschuiven (principe van Le Chatelier).



Zolang vloeistof aanwezig is, leidt de toegevoegde warmte niet tot temperatuursverhoging, maar wordt deze gebruikt om de intermoleculaire krachten te overwinnen.

Als standaard van druk wordt een druk van 1 atm wordt genomen (atmosferische druk op zeeniveau op aarde).



Voor elke vloeistof is de temperatuur waarbij de dampdruk gelijk is aan 1 atm het **NORMAAL kookpunt** van de vloeistof.

*Bijvoorbeeld: het normaal kookpunt van zuiver water is 100°C. Bij deze temperatuur is de dampdruk gelijk aan 1 atm (=760 mmHg = 760 Torr= 101,3 kPa) (Tabel 3.8, Figuur 3.23 volle horizontale lijn).*



Uit de definitie van het kookpunt volgt: **een bepaalde vloeistof (bijv. water, ethanol, ...) kan bij elke temperatuur aan het koken worden gebracht door variatie van de omgevingsdruk.**

*Uit Figuur 3.23 volgt bijv. dat op een hoogte van 8848 m (op de Mount Everest) waar de omgevingsdruk laag is (0,355 atm of 270 torr) is, het kookpunt van water lager dan 80°C is en heel wat lager is dan 100 °C (het kookpunt van water bij een omgevingsdruk van 1 atm (op zeeniveau)).*

Uit Figuur 3.23 blijkt logischerwijs ook: dat **het (normaal) kookpunt van chemische verbindingen hoger is naarmate de intermoleculaire aantrekkingskrachten tussen (en de polariteit van) de moleculen sterker is.**

§ 3.3.4.2

Immers bij sterke intermoleculaire aantrekking dient men de vloeistof meer te verwarmen (naar een hogere temperatuur) opdat de vloeistofmoleculen voldoende kinetische energie verkrijgen om aan deze aantrekkingen te kunnen ontsnappen.

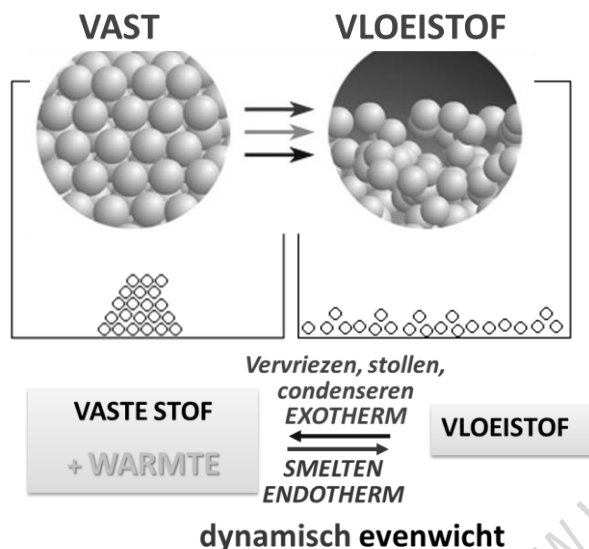
De dampdruk zal dus bij moleculen die meer polair zijn pas bij hogere temperatuur gelijk worden aan de waarde van de omgevingstemperatuur (of 1 atm voor normaal kookpunt).



**Moleculen met hogere polariteit of hoge polariseerbaarheid hebben dus hogere (normale) kookpunten.**

### 3.3.5 Vaste stoffen

In een vaste verbinding bij een temperatuur  $T$  zijn de intermoleculaire krachten tussen naburige moleculen sterk genoeg om deze in gefixeerde posities te houden (Figuur 3.15 & Figuur 3.24, links). De moleculen zijn constant in contact met dezelfde nabuurmoleculen (als in een rooster). Ze bezitten niet genoeg kinetische energie om van elkaar weg te bewegen. Ze vibreren en spinnen (roteren) wel rond een vaste plaats in de ruimte dus rond een punt dat in de ruimte vastligt relatief ten opzichte van hun nabuurmoleculen.



Figuur 3.24

Wanneer de temperatuur toeneemt, zullen de deeltjes gemiddeld sterker vibreren en als gevolg hiervan zal een vaste stof (lichtjes) uitzetten. Als nog meer warmte wordt toegevoegd kunnen de deeltjes voldoende kinetische energie (vibratie-energie) verkrijgen zodat ze uit rooster 'ontsnappen' (de kinetische energie wordt dan groter dan de sterkte van de intermoleculaire aantrekkingen in het rooster): **de vaste stof smelt (overgang van vast naar vloeibaar, verbruikt warmte, endotherm proces)**. Het omgekeerde proces (Figuur 3.24, onder) is een exotherm condensatieproces (er komt warmte bij vrij).

Het smeltpunt van een vaste stof bij een bepaalde druk is de temperatuur waarbij een dynamisch evenwicht bestaat tussen smelten (vast naar vloeistof) en vervriezen (vloeistof naar vast). Smelten vereist energie omdat de aantrekkingskrachten tussen de deeltjes in de vaste stof deels dienen overwonnen te worden. Dit kan enkel als de deeltjes gemiddeld een hogere kinetische energie krijgen. De niet-covalente krachten zijn voor een vaste stof die uit moleculen bestaat de IMKs; voor een zout is dit de sterke ionbinding en voor een metaal de sterke metaalbinding (zie ook §2.8, §3.2.5 en Tabel 3.9).

Moleculaire vaste stof, zout en metaal zijn de **drie types vaste stoffen** waarin de deeltjes door niet-covalente elektrostatiche aantrekkingskrachten worden bij elkaar gehouden.

Hun eigenschappen zijn weergegeven in Tabel 3.9.

Merk op dat de relatieve waarde van het smeltpunt verband houdt met de sterkte van de niet-covalente aantrekkingen tussen de deeltjes .

*Voorbeelden: Water smelt bij 0°C, NaCl (zout) bij 801°C en MgO (zout, 2+, 2- lading op de ionen) bij 2852°C.*

**Smeltwarmte** wordt gedefinieerd als de hoeveelheid warmte vereist om 1 g van een vaste stof in vloeibare vorm om te zetten.

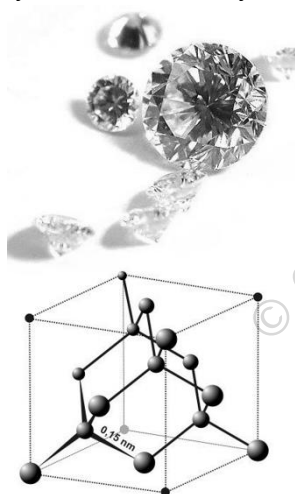
Wanneer aan een stof bij het smeltpunt warmte wordt toegevoegd, zal meer vaste stof in vloeibare vorm overgaan (volgens principe van Le Chatelier: een systeem in dynamisch evenwicht reageert op een 'stress' in casu warmte, door deze stress weg te werken waarbij een nieuw dynamisch evenwicht bekomen wordt).

Type vaste stof	Moleculaire vaste stof	Ionaire verbinding (zout)	metaal
deeltjes	moleculen	ionen	metaalatomen
Aantrekkingskracht tussen deeltjes	H-bruggen, dipool-dipool, londonkrachten	ionbinding	metaalbinding
voorkomen	zacht	Hard, breekbaar	Hard of zacht, smeedbaar
smeltpunt	laag	hoog	hoog
voorbeeld	Glucose, ammoniak, water, methaan	Natriumchloride, bariumsulfaat, ijzer(II)oxide	Zilver, koper, ijzer, natrium



In de vaste toestand zitten de deeltjes (moleculen, atomen, ionen) geordend. Dit kan ofwel volgens een regelmatig, zich herhalend patroon van omringing (kristallijne vaste stoffen) of vrij willekeurig (amorfe (uit het Grieks: zonder vorm) vaste stoffen). Ionaire vaste stoffen (zie Figuur 2.9) en kwarts ( $\text{SiO}_2$ ) zijn voorbeelden van kristallijne vaste stoffen, glas is een voorbeeld van een amorfe vaste stof.

Naast de drie types vaste stoffen in Tabel 3.9 bestaat een **vierde type, de netwerk atomaire vaste stof**, dat een beetje een buitenbeentje is omdat het volledig gebaseerd is op covalente bindingen. Op de



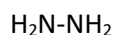
roosterposities van de vaste stof bevinden zich atomen en deze zijn onderling via covalente bindingen op elkaar gebonden. Voorbeelden zijn  $\text{SiO}_2$  (kwarts), diamant (zie Figuur 3.26) en grafiet. Tot nu toe hebben we covalente bindingen beschouwd als krachten binnenin één molecule. Hier kan niet echt van één molecule worden gesproken aangezien het aantal atomen niet vast ligt (de grootte van een diamant kan verschillen). Deze vaste stoffen hebben extreem hoge smeltpunten daar in dit geval covalente bindingen dienen verbroken te worden. Diamant smelt pas bij een temperatuur van  $3550^\circ\text{C}$  bij 1 atm. Diamant is ook zeer hard en geleidt geen elektrische stroom want alle elektronen worden gedeeld tussen de C-atomen die zelf gefixeerd zitten in een rigid netwerk door de onderlinge covalente bindingen.

Figuur 3.26: In diamant is ieder C-atoom tetraëdrisch omringd door vier andere C-atomen wat aanleiding geeft tot de vorming van een rigid netwerk. Deze structuur wordt voortgezet in de drie dimensies.

### 3.4 TOEPASSINGEN VAN DE THEORIE OP VOORBEELDMOLECULEN



- Ga na hoeveel maal een ammoniakmolecule (stikstoftrihydride,  $\text{NH}_3$ , *te kennen*) als donor of acceptor voor H-brugvorming kan optreden. Teken waterstofbrugvorming tussen drie ammoniakmoleculen.
- Ga na hoeveel maal een azijnzuurmolecule ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ , *te kennen*) als donor of acceptor voor H-brugvorming kan optreden. Doe hetzelfde voor een methaanmolecule ( $\text{CH}_4$ , *te kennen*).
- Teken waterstofbrugvorming tussen een watermolecule en een waterstoffluoridemolecule. Doe hetzelfde tussen één azijnzuurmolecule en verschillende watermoleculen.
- Tussen chloride-ionen en watermoleculen kunnen ion-dipoolmoleculen optreden. Illustreer dit met een tekening.
- Bij welke van volgende verbindingen is waterstofbrugvorming mogelijk?



- Welke type IMK** treedt op bij de volgende moleculen:  $\text{HBr}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CHBr}_3$ ,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{Cl}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{SO}_2$ ?

*Kies uit: Dipool-dipoolkracht + Londonkracht; waterstofbrugvorming + Londonkracht; Londonkracht. Bouw voor je antwoord telkens een stapsgewijze argumentatie op om je antwoord te verklaren. Om hierop te antwoorden dien je de polariteit van de moleculen te kennen. Deze argumentatie omvat dus de redenering waarom deze moleculen al dan niet polair zijn (stappenplan §2.6.4.2, dit werd voor deze moleculen al onderzocht in opgaven Hoofdstuk 2, zie ook file Moleculaire geometrie en polariteit).*

- Gegeven de chemische verbindingen  $\text{PCl}_3$  en  $\text{BCl}_3$  (extra gegeven voor de Lewisstructuur van  $\text{BCl}_3$ : SG = 3, omringingstype  $\text{AB}_3$ , zie hoofdstuk 2)  
*Met deze opgegeven verbindingen kan op verschillende wijzen je kennis gepolst worden. Hieronder een aantal voorbeelden van vraagstellingen (leerstof hoofdstuk 2+3)*
  - Welke verbinding heeft de hoogste dampdruk bij 0°C? Leg duidelijk uit.
  - Waarom is  $\text{PCl}_3$  een vloeistof bij kamertemperatuur en  $\text{BCl}_3$  een gas? Staaf je antwoord met een stapsgewijze argumentatie.
  - De kookpunten van deze verbindingen werden gemeten : 76,1 °C en 12,5°C. Welk kookpunt hoort bij welke verbinding? Leg uit.
  - Welke van beide verbindingen zal het meest vluchtig zijn?

Analoge vraagstellingen kan je krijgen voor bijvoorbeeld:

- ✓  $\text{Cl}_2$  en  $\text{HCl}$
- ✓  $\text{H}_2\text{O}$  en  $\text{HCl}$
- ✓  $\text{CH}_4$  en  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$

- Toepassingen van de universele gaswet (of vereenvoudigde versies ervan). *Ga er steeds van uit dat de gassen zich ideaal gedragen, tenzij anders vermeld. Gebruik Tabel 3.3 en de waarden voor de universele gasconstante R in § 3.3.3.3. (deze worden steeds gegeven).*
  - Een luchtstaal van 1,00 liter bij kamertemperatuur en een druk van 1,000 atm wordt samengedrukt tot 3,30 ml door een drukverhoging tot 1000 atm. Wat is de temperatuur van het luchtstaal na compressie?
  - Een container van 5,0 liter is gevuld met een ideaal gas bij een temperatuur van 30,0°C en druk van 1 atm. Hoeveel mol van het gas zijn aanwezig in de container?

- c. Een ideaal gas wordt in een rigide container met een volume van 5,00 liter gebracht bij een druk van 0,96 atm en een temperatuur van 50,0 °C en vervolgens opgewarmd tot 150 °C. Bepaal de druk van het gas na verwarmen?
- d. Een ballon met volume 2,5 m<sup>3</sup> wordt losgelaten op het aardoppervlak (druk 1 atm = 100 kPa). De luchtdruk op de ballon daalt wanneer deze opstijgt en bedraagt slechts 50 kPa op een hoogte van 6,0 km. Hoe is het volume van de ballon veranderd? (veronderstel dat de temperatuur niet wijzigt)
- e. Een gasmengsel van de twee gassen CO<sub>2</sub> en CH<sub>4</sub> met respectievelijke partiële drücken  $P_{\text{CO}_2}$  en  $P_{\text{CH}_4}$  van 0,175 en 0,250 atm, neemt een volume van 2,00 liter in bij 65,0°C. Wat is het totaal aantal mol aanwezig in het mengsel?
9. Herbekijk opgave 8c en verklaar op basis van KMT (kinetisch moleculaire theorie) de drukverandering die optreedt.
10. Eén mol PCl<sub>3</sub> wordt van 25°C naar 50°C gebracht. Het kookpunt van PCl<sub>3</sub> is > 70°C. Leg uit wat zal gebeuren (macroscopisch en op moleculair niveau) bij de temperatuursverhoging van 25°C naar 50 °C.
11. Herbekijk figuur 3.16: Stel zelf argumentaties op om elk van de getoonde overgangen te verklaren met behulp van de kinetisch moleculaire theorie.
12. Herbekijk figuur 3.23. Leg het stijgend verloop van de curve voor ethanol bij stijgende temperatuur uit (kinetisch moleculaire verklaring en op basis van de wet van le Châtelier).
13. Zoek de structuurformule van ethyleenglycol en ethanol op en leg het sterke verschil in dampdruk bij 60°C voor deze twee verbindingen uit. *Gebruik in je argumentatie de balans IMK/KE en de Boltzmanverdeling van kinetische energie in de populaties van moleculen bij de gegeven temperatuur.*
14. Gegeven CF<sub>4</sub>, normaal kookpunt -182°C en CCl<sub>4</sub>, normaal kookpunt -123°C. Eén mol CF<sub>4</sub> weegt slecht de helft van 1 mol CCl<sub>4</sub>. Verklaar het verschil in kookpunt (*specificeer in detail de bepalende factor*).
15. De nettodipoolmomenten  $\mu_{\text{netto}}$  van CH<sub>3</sub>Cl en CH<sub>3</sub>I zijn 1,87 D en 1,62 D. Hun kookpunten zijn respectievelijk 249,0 K en 315,6 K. Leg uit hoe dit mogelijk is. Gebruik Tabel 3.3

### 3.5 OBJECTIEVEN HOOFDSTUK 3 (CHECKLIST)



- Je kunt voor moleculen het **onderscheid** beschrijven tussen intramoleculaire krachten (i.e. chemische bindingen werkzaam in de molecule) en intermoleculaire krachten (IMKs, werkzaam tussen de moleculen) en dit illustreren m.b.v. een voorbeeld. Je weet voor welke eigenschappen van moleculaire verbindingen elk van deze krachten bepalend zijn. Je kent het niet-covalent en zwakker karakter van IMKs.
- Je kunt de **drie verschillende types intermoleculaire krachten (IMKs)** (synoniem: intermoleculaire aantrekkingen) in het bijzonder dipool-dipoolkracht, geïnduceerde dipool-dipoolkracht en waterstofbrug in detail beschrijven (algemeen en met voorbeeld). Je weet bij welk type moleculen deze types optreden en kan hierbij voorbeelden opgeven.
- **Je kunt voor opgegeven moleculen aangeven welk type intermoleculaire krachten er zullen bij optreden (zie ook flow schema op p 87) en je kan dit verklaren op basis van de bindingsdipoolmomenten, moleculaire geometrie, het nettodipoolmoment, de polariteit van de moleculen (! zie hoofdstuk 2, koppel IMK aan stappenplan in § 2.6.4 en zie ook file op Ufora) en/of de polariseerbaarheid van de moleculen.** Belangrijk: Je kunt op basis hiervan voorspellingen doen of vergelijkingen maken i.v.m. eigenschappen van opgegeven chemische verbindingen zoals dampdruk, kookpunt, ... (zie lager). Bij polaire moleculen weet je dat dipool-dipoolkrachten en H-bruggen samen met Londonkrachten/dispersiekrachten voorkomen.
- Je kent het verband tussen de aantrekkingsenergie  $E$  en de intermoleculaire afstand  $r$ . voor de verschillende IMKs. Je kunt uitleggen (en toepassen op voorbeelden) dat de polariseerbaarheid van moleculen hierbij een rol speelt. Je kent in dit verband het belang van de grootte van de molecule en grootte en vorm van het moleculair oppervlak (~ contactoppervlak.) (dit wordt later ook toegepast in Deel II)
- Je kent de **begrippen** van der Waalskracht, dispersiekracht, Londonkracht, ion-dipoolkracht (of ion-dipoolinteractie), waterstofbrugvorming, hydratatie, solvatatie, hydrofiel, hydrofoob (zie ook Hoofdstuk 4)
- Voor **H-brugvorming**: Je kent de voorwaarden waaraan donor- en acceptormoleculen moeten voldoen om elkaar onderling via H-bruggen aan te trekken. Je herkent bijgevolg in opgegeven voorbeelden of deze moleculen onderling elkaar via H-bruggen kunnen aantrekken (vb voor azijnzuurmoleculen, zie ook deel II). Je kunt de waterstofbrugvorming documenteren door deze te tekenen tussen 2 of meer moleculen van zelfgekozen of opgegeven voorbeelden (bijv. voor water- of ammoniakmoleculen). Je kunt aangeven of een molecule als donor- of als acceptormolecule (of als beide, of meerdere malen als donor of als acceptor) kan optreden bij H-brugvorming. Je weet dat H-bruggen tussen identieke deeltjes en tussen moleculen van verschillende chemische verbindingen kunnen optreden (tussen ammoniakmoleculen en watermoleculen).
- Je kent de regels voor de **relatieve sterkte van de intermoleculaire krachten en je kunt deze toepassen op voorbeeldverbindingen**. Je kent de sterkte van deze niet-covalente krachten in relatie tot de sterkte van covalente bindingen, ionbindingen en metaalbindingen.
- Je kunt beschrijven dat **tussen ionen en (polaire of apolaire) moleculen** aantrekkingskrachten optreden (ion-dipool of ion-geïnduceerde dipoolinteractie) (zie ook hoofdstuk 4).
- Je kent een aantal biologische/biochemische toepassingen van IMK in processen (als aanzet tot Deel III).
- Je kent de **drie aggregatietoestanden** van materie en kan uitleggen waarin deze macroscopisch verschillen (qua volume, vorm, dichtheid en samendrukbaarheid) alsook wat het verschil is op moleculair niveau (zie ook lager).
- Je kent de **kinetische moleculaire theorie (KMT)** als het verklarend model van de eigenschappen van materie vanuit het gedrag van de individuele deeltjes. Je kent de vier concepten van de KMT. Je kent het **verband tussen gemiddelde moleculaire snelheid/gemiddelde kinetische energie en absolute temperatuur** (eenheid Kelvin).
- Je kunt uitleggen (en kunt grafisch weergeven) dat moleculaire snelheid en kinetische energie in een populatie van deeltjes volgens een **Boltzmann-distributie** verdeeld zijn (zie ook lager).
- **Je kunt de drie aggregatietoestanden beschrijven vanuit KMT-oogpunt en begrijpt hierbij het belang van de balans (of competitie: welke factor is dominant?) tussen gemiddelde kinetische energie van de deeltjes (bij een bepaalde temperatuur) enerzijds en de sterkte van de intermoleculaire krachten anderzijds** (a.o. Figuur 3.15).

- Je kunt bijgevolg de overgangen van vast naar vloeibaar en naar gasvorm die optreden voor een opgegeven chemische verbinding bij verhogen van de temperatuur (of veranderen van de druk) uitleggen op basis van veranderingen in de balans tussen  $KE_{\text{gem.}}$  en optreden van IMKs.
- Je kunt anderzijds verklaren waarom bij eenzelfde temperatuur opgegeven voorbeeldmoleculen (waarvan je kan afleiden (op basis van hfdst 2!) dat ze een verschillende polariteit hebben) in verschillende aggregatievormen voorkomen.
- Je kent de **aangepaste KMT**-concepten voor een **gas** en voor een **ideaal gas**.
- Je kent de verschillende eenheden gehanteerd voor **gasdruk** (je dient enkel voor atm  $\rightarrow$  mm Hg de conversiefactor te kennen.) Je weet hoe gasdruk te verklaren is vanuit moleculair oogpunt.
- Je kent **de ideale gaswet**. Je begrijpt dat de waarde van de universele gasconstante R varieert naargelang de gebruikte eenheid voor druk en/of volume (waarden worden opgegeven). Je kan de ideale gaswet (of de gaswetten) toepassen.
- Je kunt voor gassen de druk-volume-relatie, de druk-temperatuur-relatie, de volume-temperatuurrelatie, de relatie tussen aantal mol en volume en de wet van de partiële drukken uitleggen vanuit KMT-oogpunt.
- Je kent het **getal van Avogadro  $N_A$** , de begrippen: **mol** (zie ook later), **STP-condities**, **molair volume**.
- Je kent algemeen de condities van druk en temperatuur waarbij een reëel gas zich het sterkst als een ideaal gas gedraagt. (van der Waalsvergelijking: niet kennen).
- Je kunt de dynamisch evenwichten bij de overgang van vast naar vloeibaar en bij de overgang van vloeibaar naar gasvorm beschrijven. Je weet waarom hierbij warmte vereist is, m.a.w. je kunt dit (dus het verdampingsproces) verklaren vanuit het gedrag van moleculen.
- Je kent de begrippen **dynamisch evenwicht**, **endotherm**, **exotherm** en **het principe van Le Châtelier**.
- Je kunt de **processen van verdampen en koken** in detail beschrijven (uitleg uiteraard met de rol en sterkte van IMK, temperatuur, gemiddelde kinetische energie, distributie van kinetische energie in een populatie van vloeistofmoleculen en het effect van temperatuur hierop).
- Je kunt uitleggen waarin koken 'verschilt' van verdampen.
- Je kent de begrippen **dampdruk**, **kookpunt** en **normaal kookpunt** van een chemische verbinding.
- Je kunt beschrijven en verklaren dat de **dampdruk** van een welbepaalde chemische verbinding in relatie staat met **de temperatuur**. Je kunt dit laatste toepassen op voorbeeldsituaties.
- Je kunt in detail uitleggen hoe en waarom **de waarde van de (1) dampdruk en (2) (normaal) kookpunt afhangt van de polaire/apolaire eigenschappen van de moleculen en bijgevolg van de intermoleculaire krachten die ertussen optreden**. Je kunt dit laatste toepassen op voorbeelden.
- (*In overlap met voorgaande objectieven*): Je kent en kunt uitleggen voor een bepaalde verbinding: **de relaties tussen polariteit, intermoleculaire aantrekking, dampdruk, kookpunt, normaal kookpunt en vluchtigheid**. Je kunt dit toepassen op voorbeelden, m.a.w. je kan vanuit je kennis van de moleculaire eigenschappen (polariteit, intermoleculaire aantrekking) en de gemiddelde kinetische energie en kinetische energieverdeling bij de temperatuur van de verbinding uitleggen waarom opgegeven verbindingen verschillen in vluchtigheid, verschillen in kookpunt of in dampdruk bij een bepaalde temperatuur enz. (zie opgave 7 in §3.4)
- Je kunt de vaste aggregatietoestand beschrijven op basis van het gedrag van de moleculen; Je kent de drie types vaste stoffen (moleculaire vaste stof, zout, metaal), hun (relatieve) eigenschappen en voorbeelden (dit volgt ook uit hoofdstuk 2).

<b>3</b>	<b>INTERMOLECULAIRE AANTREKKINGSKRACHTEN EN AGGREGATIETOESTANDEN VAN DE MATERIE .....</b>	<b>87</b>
3.1	MOLECULEN KUNNEN ELKAAR AANTREKKEN.....	87
3.2	VERSCHILLENDE TYPES INTERMOLECULAIRE AANTREKKINGSKRACHTEN .....	89
3.2.1	<i>Dipool-dipoolkrachten: IMK tussen polaire moleculen.....</i>	90
3.2.2	<i>Geïnduceerde dipool-dipoolkrachten: IMK tussen apolaire moleculen .....</i>	92
3.2.3	<i>Waterstofbrugvorming.....</i>	96
3.2.4	<i>Elektrostatistische aantrekking tussen ionen en (a)polaire moleculen .....</i>	99
3.2.5	<i>Relatieve sterkte van de verschillende types zwakke krachten .....</i>	100
3.2.6	<i>(Biologisch) Belang van intermoleculaire, niet-covalente krachten .....</i>	102
3.3	DE AGGREGATIETOESTANDEN VAN DE MATERIE.....	106
3.3.1	<i>Inleiding.....</i>	106
3.3.2	<i>De Kinetisch Moleculaire Theorie .....</i>	107
3.3.2.1	Concepten .....	107
3.3.2.2	De verdeling van kinetische energie in een populatie van deeltjes/moleculen .....	108
3.3.2.3	Aggregatietoestanden van de materie: beschrijving volgens de kinetisch moleculaire theorie .....	109
3.3.3	<i>Gassen .....</i>	112
3.3.3.1	Kinetisch moleculaire theorie (KMT) voor gassen - ideaal gas .....	112
3.3.3.2	Vier meetbare eigenschappen definiëren een gas .....	113
3.3.3.3	De universele gaswet.....	115
3.3.3.4	Reële gassen gedragen zich ideaal bij STP-condities .....	118
3.3.4	<i>Vloeistoffen .....</i>	120
3.3.4.1	Inleiding.....	120
3.3.4.2	Het verdampingsproces en de dampdruk van een vloeistof. ....	121
3.3.4.3	Koken - Kookpunt en Normaal Kookpunt .....	125
3.3.5	<i>Vaste stoffen .....</i>	128
3.4	TOEPASSINGEN VAN DE THEORIE OP VOORBEELDMOLECULEN.....	130
3.5	OBJECTIEVEN HOOFDSTUK 3 (CHECKLIST) .....	132



## Deel II: Organische Chemie



In de chemie deelt men de materie op in twee grote categorieën. Chemische verbindingen die geïsoleerd worden uit planten en dieren of hun oorsprong hebben in plantaardig of dierlijk materiaal, worden ‘**organische verbindingen**’ genoemd. Verbindingen die in de natuur voorkomen in mineralen, worden met de term ‘anorganisch’ aangeduid. Deze indeling stamt uit de beginperiode van de chemische wetenschap wanneer men, ten onrechte, veronderstelde dat organische verbindingen enkel binnenin levende organismen konden worden aangemaakt en dat daarvoor als het ware ‘levenskracht’ vereist was.

Ondanks deze eerdere misconceptie, blijft deze indeling nuttig: Organische verbindingen of verbindingen uit biologische systemen onderscheiden zich immers van anorganische doordat ze voor een aanzienlijk deel uit het element **koolstof** zijn opgebouwd. De organische chemie wordt bijgevolg de **chemie van de koolstofverbindingen** genoemd. Verbindingen zoals calciumcarbonaat ( $\text{CaCO}_3$ ) of de elementaire vormen van koolstof (diamant, grafiet) zijn echter geen organische verbindingen vandaar dat organische chemie meestal gedefinieerd wordt als de **chemie van de verbindingen die koolstof én waterstof bevatten**.

Alle levende organismen zijn hoofdzakelijk opgebouwd uit organische verbindingen. De structurele bouwstenen en de informatiedragende componenten van dieren en planten (eiwitten, lipiden, nucleïnezuren, ...) zijn organische moleculen. De essentiële omzettingsreacties die in organismen doorgaan, gaan dan ook terug op de typische eigenschappen van deze organische verbindingen. Een belangrijk deel van onze voeding maar ook stoffen als hout, papier, kunststoffen, veel medicijnen, bestrijdingsmiddelen, kleur-, geur- en smaakstoffen bestaan uit of bevatten organische verbindingen. Dit alles onderstreept het belang van dit onderdeel van de chemie.



**Deel II: Organische Chemie** start met een inleidend **hoofdstuk 7** waarin basisconcepten uit Deel I worden hernomen met focus op koolstofverbindingen. **Hoofdstuk 8** behandelt specifiek de koolstofverbindingen die enkel C en H-atomen bevatten en alle dus apolair van aard zijn. **Hoofdstuk 9** neemt de sprong naar organische verbindingen zoals de alcoholen, de amides en de esters. Daar deze verbindingen naast C en H ook ‘hetero-atomen’ voorkomen (O, S, P, N, ...), bezitten deze verbindingen meer polariteit en bijgevolg andere fysische en chemische eigenschappen.

Je zal steunen op de verworven basisprincipes uit Deel I om de chemische en fysische eigenschappen van deze verbindingen te begrijpen en zelf af te leiden.

## 7 Inleiding tot organische moleculen

### 7.1 KOOLSTOF ALS BASISELEMENT VAN ORGANISCHE VERBINDINGEN

Ondanks het feit dat koolstof in de lijst van meest voorkomende elementen in de aardkorst pas op de 17<sup>de</sup> plaats voorkomt is het het hoofdelement in alles wat leeft. Dit is een gevolg van een vrij unieke combinatie van eigenschappen van dit element:

Electronenconfiguratie	$1s^2 2s^2 2p^2$
Electronegativiteit	2,55
Ionisatie-energieën	$IE_1=1090$ kJ/mol, $IE_2=2350$ kJ/mol, $IE_3=4620$ kJ/mol, $IE_4=6220$ kJ/mol
Covalente radius	0,077 nm

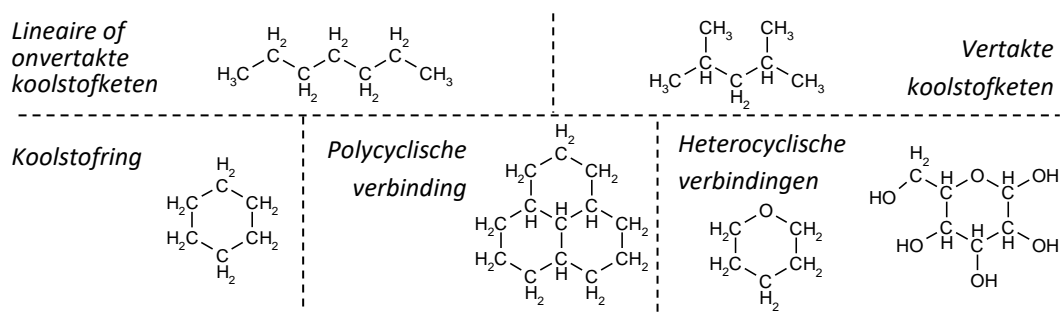
**Koolstof** staat in groep IVA in het Periodiek Systeem. Elementen in deze groep zijn niet-metalen en uniek door het feit dat ze vier valentie-elektronen hebben. Omwille van relatief lage EN-waarde en hoge ionisatie-energieën, komen koolstofionen niet voor. Koolstof gaat bijgevolg enkel covalente bindingen aan. Koolstofatomen vormen **steeds 4 covalente bindingen** (= **tetraivalent**, §2.6.3) en bereiken op deze wijze steeds **oktetconfiguratie**.



Koolstofatomen gaan covalente bindingen aan met atomen van de elementen H, O, N, P en S maar, belangrijk, ook met andere C-atomen. Slechts een beperkt aantal atomen bezitten de capaciteit om met atomen van dezelfde soort op stabiele wijze covalent te binden. De C-C bindingen zijn nagenoeg even sterk als de covalente bindingen van C met andere atomen.

Precies doordat koolstof covalentiegetal 4 heeft en stabiele C-C bindingen vormt kan het aanleiding geven tot de vorming van een enorme diversiteit aan stabiele moleculen die heel sterk verschillen in grootte en in vorm (Figuur 7.1)

Organische verbindingen bestaan uit of bevatten koolstofketens (al dan niet vertakt) of enkelvoudige of aaneengeschakelde koolstofringen. De koolstofketens of -ringen vormen het koolstofskelet van de verbinding. Het is duidelijk dat het binden van koolstof op andere elementen de diversiteit nog vergroot. Dit is geïllustreerd met onderstaande voorbeelden (*in deze structuurformules zijn ter vereenvoudiging de C-H covalente bindingen niet expliciet weergegeven, zie lager*).



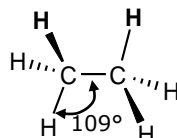
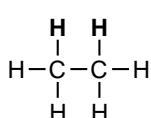
Figuur 7.1

De capaciteit van koolstof om de basis te vormen voor een dergelijk enorm groot aantal verschillende moleculen vormt een belangrijke basis voor de grote diversiteit en complexiteit van levende wezens.

## 7.2 VOORSTELLING EN INLEIDING TOT DE NOMENCLATUUR VAN ORGANISCHE MOLECULEN

Men kan de structuur van organische verbindingen via de **Lewisstructuur** neerschrijven (alles geprojecteerd in één vlak) maar informatie over bindingshoeken is hier niet uit af te leiden. Anderzijds kan men de onderlinge ruimtelijke oriëntatie van de bindingen in de molecule weergeven door de bindingen die **in het vlak** van het schrijfvlak en deze die **voor of achter dit vlak** op verschillende wijze aan te duiden.

Beide voorstellingswijzen zijn voor de eenvoudige molecule ethaan  $C_2H_6$ , waarin de C-atomen getoond zijn met rond elk C-atoom tetrahedrale omringing van de H-atomen (bindingshoek  $109.5^\circ$ , zie hoofdstuk 2, zie ook lager).



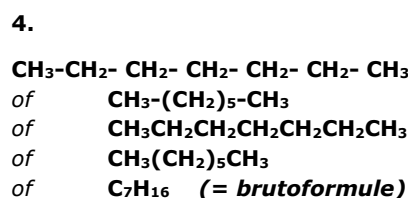
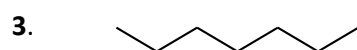
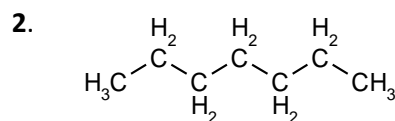
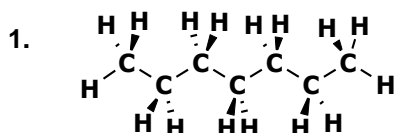
— Binding in het vlak  
 ▴ Binding vóór het vlak  
 ▾ Binding achter het vlak

Omwille van de complexiteit van organische verbindingen gebruikt men ook **sterk vereenvoudigende voorstellingen** waarbij men de covalente bindingen niet expliciet toont of zelfs de C- en/of H-atomen weglaat.

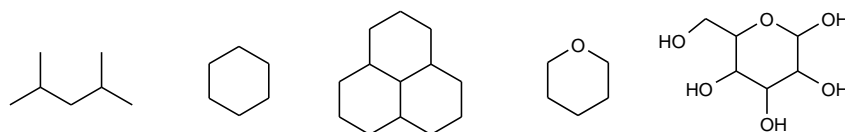
Dit is hieronder toegepast op een **onvertakte koolstofketen die 7 koolstofatomen telt** (heptaan, zie lager en hoofdstuk 8 (voorstelling 1). In voorstelling 2 van heptaan zijn de H-atomen per C-atoom getoond maar de eigenlijke C-H bindingen zijn weggelaten: het aantal H-atomen gebonden op elke C is weergegeven met een subscript bij H. De zigzaglijn tussen de C-atomen reflecteert de tetrahedrale omringing van de C-atomen (bindingshoek  $109^\circ$ , zie lager ook  $sp^3$  hybridisatie) en kan al dan niet gebruikt worden.

In de meest eenvoudige voorstelling 3, ook **skeletstructuur, skeletnotatie of zaagtandstructuur** genoemd, is enkel een zigzaglijn gebruikt: elk eind- of knikpunt van de zigzaglijn stelt een C-atoom voor. De H-atomen zijn volledig weggelaten (omdat ieder C-atoom toch steeds tetravalent is, blijven deze uit de voorstelling af te leiden). Alle C-atomen zijn in deze voorstelling verondersteld verzadigd met H-atomen.

Voorstelling 4 noemt men gecondenseerde schrijfwijzen met finaal de meest condense voorstelling: de brutoformule (die enkel de atomaire samenstelling geeft). Let op (zie later en ook in bijlage 7): een brutoformule komt vaak voor met verschillende moleculen.

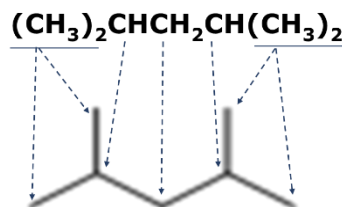


Ter illustratie zijn ook de moleculen uit Figuur 7.1 m.b.v. voorstellingswijze 3 getoond.

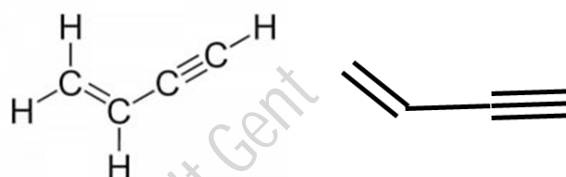


*Voorbeeld:*

Een vertakte koolstofketen (brutoformule  $C_7H_{16}$ ) op voorstellingswijzen '4' en '3'. (bindingshoeken 109,5)



*Voorbeeld:* een koolstofverbinding met meervoudige bindingen (brutoformule  $C_4H_4$ ).



Merk op dat uit VSEPR theorie (hoofdstuk 2)

volgt dat rond een dubbel gebonden koolstofatoom (omringingstype  $AB_3$ ) trigonaal planaire geometrie geldt met bindingshoek  $120^\circ$ ; rond een driedubbelgebonden C-atoom geldt lineaire geometrie ( $AB_2$ ) en een bindingshoek van  $180^\circ$ .

(zie oefeningen in § 7.8).

De **naamgeving** van organische verbindingen is gebaseerd op de nomenclatuurregels volgens IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry). Algemeen kan men stellen dat de **systematische naam** van een organische verbinding uit twee delen bestaat:

- Een **stamnaam** die aangeeft **hoeveel koolstofatomen** aanwezig zijn in de langste keten van koolstofatomen. De langste keten wordt ook **hoofdketen** genoemd. De stamnamen voor een koolstofketen tot en met 12 C-atomen zijn weergegeven in Tabel 7.1.

- De hoofdketen kan zij-koolstofketens dragen waarvoor opnieuw een stamnaam wordt gebruikt gebaseerd op de lengte van de **zijketens** maar dan met uitgang **-yl** (Tabel 7.1, zie ook verder § 8.1.2).

De algemene naam voor een koolstofzijketen is **alkyl(keten)** ook verkort met **'R'** weergegeven.



- Een **voorvoegsel (prefix) en/of een achtervoegsel (suffix)** dat aangeeft tot welke familie de verbinding behoort.

Bijv. ethaan: eth- slaat op twee C-atomen in de hoofdketen, -aan is het achtervoegsel dat er op wijst dat deze verbinding tot de familie van de alkanen behoort.



Tabel 7.1: IUPAC stamnamen

Aantal C-atomen	Stamnaam hoofdketen	als onvertakte zijketen op een langere keten (algemeen <u>alkyl</u> -groep (-R))
1	meth	methyl -CH <sub>3</sub>
2	eth	ethyl -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
3	prop	propyl -(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
4	but	butyl -(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -CH <sub>3</sub>
5	pent	pentyl -(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> -CH <sub>3</sub>
6	hex	hexyl -(CH <sub>2</sub> ) <sub>5</sub> -CH <sub>3</sub>
7	hept	heptyl -(CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> -CH <sub>3</sub>
8	oct	octyl -(CH <sub>2</sub> ) <sub>7</sub> -CH <sub>3</sub>
9	non	nonyl -(CH <sub>2</sub> ) <sub>8</sub> -CH <sub>3</sub>
10	dec	decyl -(CH <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> -CH <sub>3</sub>

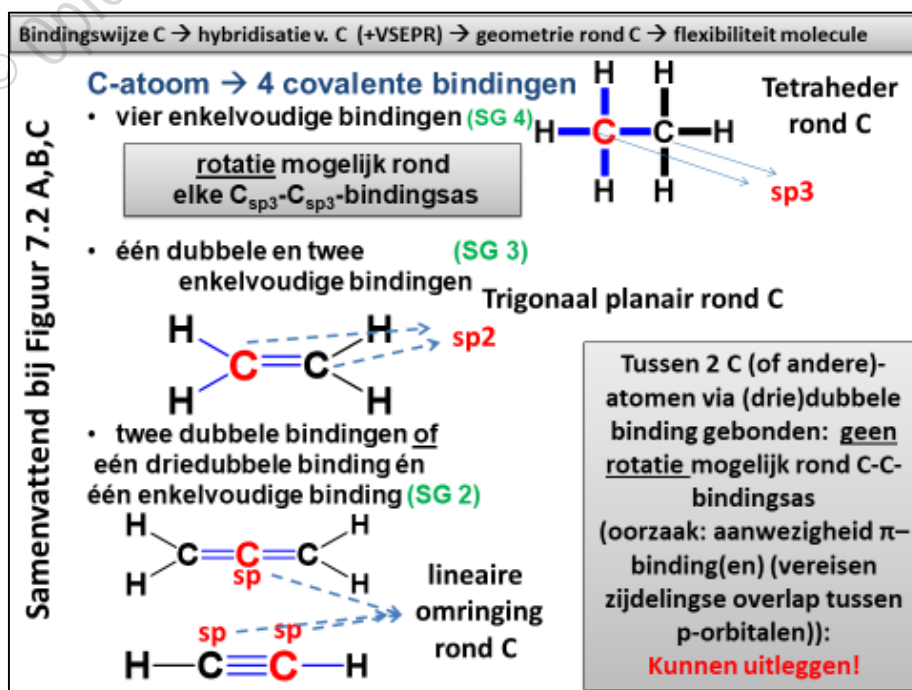
### 7.3 EVEN STILSTAAN BIJ ...KOOLSTOF-KOOLSTOFBINDINGEN

Een **C-atoom** kan in moleculen tetravalentie (en oktetconfiguratie) bereiken door vier enkelvoudige covalente bindingen aan te gaan of door een combinatie van enkelvoudige en meervoudige bindingen aan te gaan (Figuur 7.2 A, B, C).

M.b.v. VSEPR (Deel 1, hoofdstuk 2, Tabel 2.9) en de Valentiebindingstheorie en de kennis van hybridisaties (Deel 1, hoofdstuk 2, Tabel 2.10 sp, sp<sup>2</sup>, sp<sup>3</sup> hybridisatie) kunnen we voorspellen welke de ruimtelijke omringing zal zijn rond elk C-atoom gebonden zijn in een organische molecule. Dit zal verschillen naargelang een C-atomen ofwel vier enkelvoudige bindingen aangaat ofwel een combinatie van enkelvoudige en meervoudige bindingen aangaat.

Dit is in dit schema samengevat en meer in detail geïllustreerd met voorbeelden van eenvoudige moleculen in Figuur 7.2.


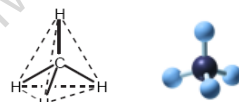
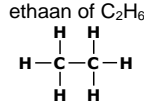
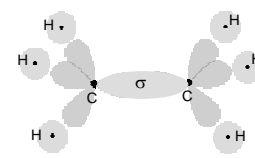
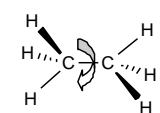
H2 §2.6.3, 2.6.4.,  
2.6.5.1.2



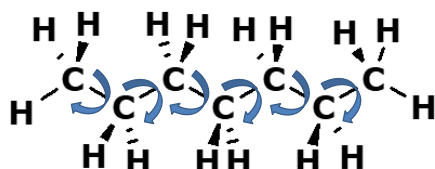


Hieruit blijkt dat kennis van de **geometrie** rond de C-atomen niet alleen inzicht geeft in de vorm (geometrie) van organische moleculen maar ook in hun **flexibiliteit** (bijv. door al dan niet draaibaarheid rond bepaalde bindingen van het type: sigma-binding,  $\pi$ -binding, zie §2.6.5.1.2, zie figuur 7.2A,B,C). Dit is belangrijk in het begrijpen van de chemische en fysische eigenschappen van de betrokken moleculen (zie hoofdstuk 8 en 9).

Figuur 7.2A

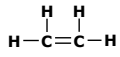

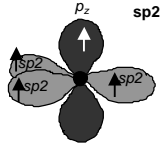

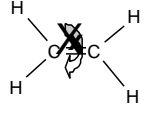
Door C-atoom gevormde bindingen:	Voorbeelden	VSEPR + voorspelde geometrie	Hybridisatie van het C-atoom en ruimtelijke omringing van de bindingen en de gebonden atomen rond het beschouwde C-atoom	Gevolg van de hybridisatietoestand voor de flexibiliteit van de moleculen
Vier enkelvoudige bindingen	Het C-atoom in methaan of $\text{CH}_4$	Telkens vier elektronen-paren rond C → <b>Tetraëdrische omringing</b>	Het C-atoom in $\text{CH}_4$ is $\text{sp}^3$ -gehybridiseerd. Dit betekent dat het s-orbitaal, het $p_x$ , $p_y$ en $p_z$ orbitaal van de valentieschaal van C gemengd zijn en vier nieuwe valentie-orbitalen vormen met elk 1 valentie-elektron van C. Deze nieuwe hybride-orbitalen zijn gericht naar de hoekpunten van een tetraëder:  Na vorming van de bindingen in methaan zitten de 4-H-atomen geschikt op de hoekpunten van een tetraëder: 	<b>Door de geometrie van de <math>\sigma</math>-binding is er vrije draaibaarheid rond elke <math>\sigma</math>-binding mogelijk.</b>  <b>Dit maakt dat moleculen die bestaan uit ketens van enkelvoudig gebonden C-atomen heel flexibel zijn.</b>
	De twee C-atomen in ethaan of $\text{C}_2\text{H}_6$		In ethaan zijn beide C-atomen in $\text{sp}^3$ -hybridisatie.  Drie van de 4 $\text{sp}^3$ -orbitalen van elk C vormen C-H binding via $\sigma$ -overlap met het s-orbitaal van H. De resterende $\text{sp}^3$ -orbitalen van elk C-atomen overlappen onderling ( $\sigma$ -binding, C-C-binding)	  In ethaan is er vrije rotatie mogelijk rondom de as gevormd door de C-C-binding zonder deze te verbreken (ook rond de as van elke C-H).

Uit Figuur 7.2 volgt:



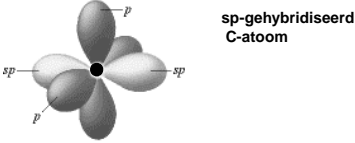
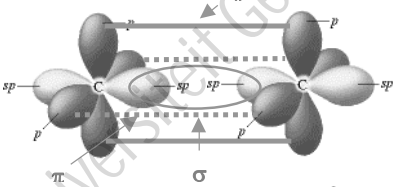
Heel flexibele moleculen

Figuur 7.2B

Door C-atoom gevormde bindingen:	Voorbeelden	VSEPR + voorspelde geometrie	Hybridisatie van het C-atoom en ruimtelijke omringing van de bindingen en de gebonden atomen rond het beschouwde C-atoom	Gevolg van de hybridisatietoestand voor de flexibiliteit van de moleculen
Een dubbele bindingen en twee enkelvoudige bindingen	<p>De C-atomen in etheen <math>C_2H_4</math>:</p>  <p>Het C-atoom in formaldehyde:</p> 	<p>Telkens drie elektronen-paren rond C (1 dubbele binding wordt als één geteld) → <b>Trigonaal planaire omringing</b></p>	<p>De C-atomen in <math>C_2H_4</math> is <math>sp^2</math>-gehybridiseerd. Dit betekent dat het s-orbitaal, het <math>p_x</math> en <math>p_y</math> orbitaal van de valentieschaal van elk C onderling gemengd zijn en drie nieuwe valentie-orbitalen vormen met elk 1 valentie-elektron van C. Deze nieuwe hybride-orbitalen zijn gericht naar de hoekpunten van een driehoek en bevatten elk een elektron. Het <math>p_z</math> orbitaal op elke C behoudt zijn oorspronkelijke vorm en oriëntatie en bevat nu ook een elektron.</p>  <p>In etheen zijn beide C-atomen in <math>sp^2</math>-hybridisatie.</p>  <p>Twee van de 4 <math>sp^2</math>-orbitalen van elk C vormen C-H binding via <math>\sigma</math>-overlap met het s-orbitaal van H. De resterende <math>sp^2</math>-orbitalen (een van elk C-atoom) overlappen onderling en vormen een C-C-binding (<math>\sigma</math>-binding). De twee <math>p_z</math>-orbitalen vormen ook een binding (<math>\pi</math>-binding) door zijdelingse overlap. De <math>\sigma</math>- en de <math>\pi</math>-C-C-bindingen vormen samen de dubbele binding (C=C).</p>	<p><b>Door de geometrie van de dubbele binding is er geen vrije draaibaarheid rond een C=C binding mogelijk.</b></p> <p><i>Een gevolg is dat de 6 covalent gebonden atomen (dus de twee C-atomen en de erop gebonden atomen) in één vlak liggen.</i></p> <p><b>Dit maakt dat in moleculen waarin de koolstofketens een dubbele binding voorkomt de flexibiliteit op die plaats beperkt is.</b></p>  <p>In etheen is er geen vrije rotatie mogelijk rondom de as gevormd door de C=C-binding zonder de <math>\pi</math>-binding te verbreken. De <math>\pi</math>-binding kan immers enkel bestaan wanneer de twee <math>p_z</math>-orbitalen op de twee C-atomen volledig parallel staan.</p>

Extra figuur van vorming  $\pi$ -binding: zie diareeks

Figuur 7.2C (C-atoom met (twee dubbele bindingen of een driedubbele + één enkelvoudige binding)

Door C-atoom gevormde bindingen:	Voorbeelden	VSEPR + voorspelde geometrie	Hybridisatie van het C-atoom en ruimtelijke omringing van de bindingen en de gebonden atomen rond het beschouwde C-atoom	Gevolg van de hybridisatietoestand voor de flexibiliteit van de moleculen
<b>Twee dubbele bindingen of een driedubbele binding</b>	De C-atomen in ethyn $C_2H_2$ :  $H-C\equiv C-H$  Het C-atoom in koolstofdioxide:  $O=C=O$  Het centrale C-atomen in :  $H-C=C-C-H$	Telkens twee elektronen-paren rond C (! de dubbele bindingen worden elk als één geteld) → <b>Lineaire omringing</b>	De C-atomen in $C_2H_2$ is $sp$ -gehybridiseerd. Dit betekent dat het $s$ -orbitaal en het $p_x$ orbitaal van de valentieschaal van elk C onderling gemengd zijn en <u>twee</u> nieuwe valentie-orbitalen vormen met elk 1 valentie-elektron van C. Deze nieuwe hybride-orbitalen liggen op een lijn en bevatten elk een elektron. Het $p_y$ en het $p_z$ orbitaal op elke C behouden hun oorspronkelijke vorm en oriëntatie en bevat nu ook elk een elektron.   <b>sp-gehybridiseerd C-atoom</b>  In ethyn zijn beide C-atomen in $sp$ -hybridisatie.    Een van de 2 $sp$ -orbitalen van elk C vormt een C-H binding (niet getoond) via $\sigma$ -overlap met het $s$ -orbitaal van H. De resterende $sp$ -orbitalen (een van elk C-atoom) overlappen onderling en vormen een C-C-binding ( $\sigma$ -binding). De twee $p_y$ -orbitalen vormen ook een binding (eerste $\pi$ -binding) door zijdelingse overlap. De twee $p_z$ -orbitalen vormen ook een binding (tweede $\pi$ -binding) door zijdelingse overlap. De $\sigma$ - en de twee $\pi$ -C-C-bindingen vormen samen de driedubbele binding ( $C\equiv C$ ).	<b>Door de geometrie van de dubbele-bindingen is er <u>geen vrije draaibaarheid</u> rond een <math>C\equiv C</math> binding mogelijk.</b>  <b>Dit maakt dat in moleculen waarin in de koolstofketens een driedubbele binding of twee opeenvolgende dubbele voorkomt de flexibiliteit op die plaats beperkt is.</b>  In ethyn is er geen vrije rotatie mogelijk rondom de $C\equiv C$ -binding zonder de $\pi$ -bindingen te verbreken. De $\pi$ -bindingen kunnen immers enkel bestaan wanneer de twee $p_z$ -orbitalen en de twee $p_y$ op de twee C-atomen volledig parallel staan.

Figuur 7A leert dat open-keten koolwaterstofverbindingen met enkel enkelvoudige bindingen door de vrije draaibaarheid rond alle C-C-bindingen (sigma-bindingen) geen unieke vorm hebben maar heel flexibele moleculen zijn. Dit beïnvloedt de wijze waarop dergelijke moleculen onderling contact maken via zwakke intermoleculaire krachten (zie hoofdstuk 3, polariseerbaarheid)

Figuur 7B en C leren dat in open-keten koolwaterstofverbindingen met dubbele of driedubbele C-C bindingen geen rotatie mogelijk is ter hoogte van de meervoudige C-C-binding (door aanwezigheid sigma en pi-bindingen (en parallel overlap van p-orbitalen) en dit beperkt het aantal vormen dat deze moleculen kunnen aannemen en bijgevolg hun polariseerbaarheid bij onderling contact.

In moleculen met ringstructuren kan je ook aan elke C-atoom een hybridisatietoestand toewijzen. De gesloten ringstructuur is hier uiteraard een extra bepalende factor in de beperkte rotatie rond de C-C-assen in de ring en dus in vorm en flexibiliteit van de moleculen. Ook daar zijn echter verschillen wanneer de C-atomen in de ring  $sp^3$ ,  $sp^2/sp$  gehybridiseerd zijn.

Deze aspecten komen opnieuw aan bod in hoofdstuk 8.



## 7.4 INDELING VAN DE ORGANISCHE VERBINDINGEN

Meer dan zeven miljoen organische verbindingen zijn beschreven, elk met hun eigen typische chemische en fysische eigenschappen bijv. in verband met hun reactiviteit met O<sub>2</sub>, hun kook- en smeltpunt enz.

Men heeft, ter vereenvoudiging, in de organische chemie een **aantal families of groepen van verbindingen** gedefinieerd die gekenmerkt worden door specifieke eigenschappen.

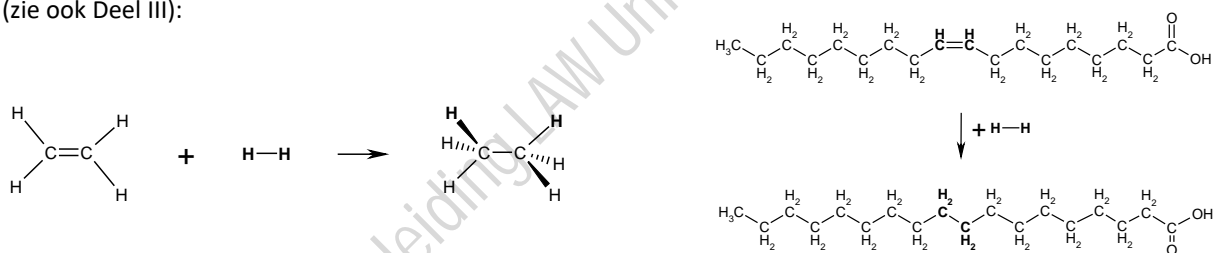
De families verschillen door het voorkomen in de verbindingen van een verschillende functionele groep.

Een **functionele groep** wordt gevormd door een groep atomen die op specifieke wijze onderling covalent gebonden zijn. De functionele groep is zelf gebonden op of opgenomen in het koolstofskelet van de verbinding.

De functionele groep draagt zijn specifieke chemische en fysische eigenschappen over aan de volledige molecule: **De specifieke eigenschappen van een organische molecule met een welbepaalde functionele groep worden in hoofdzaak bepaald door de aanwezige functionele groep.**

Dit wordt duidelijker met een voorbeeld:

De alkenen zijn een groep van organische verbindingen gekenmerkt door het voorkomen van minstens één koolstof-koolstof dubbele binding. Deze dubbele binding is de functionele groep. Het eenvoudigste alkeen, etheen, reageert met waterstofgas volgens de reactie linksonder. Complexere moleculen die eveneens een koolstof-koolstof dubbele binding bevatten (dus dezelfde functionele groep bevatten) zullen tot dezelfde familie behoren en bijgevolg op zelfde manier reageren. Een voorbeeld is de biologisch belangrijke vetzuurmolecule oleïnezuur (rechts) die ondermeer ingebouwd is in de nog complexere vetten die de celmembranen gaan vormen (zie ook Deel III):




De eigenschappen van een chemische verbinding worden in eerste instantie bepaald door de aanwezige functionele groepen, niet door zijn grootte of complexiteit.

Het voorbeeld oleïnezuur illustreert dat organische verbindingen **meer dan één functionele groep** kunnen bevatten. Naast de dubbele koolstof-koolstofbinding is er ook een -COOH (carboxyl)- groep aanwezig. Deze functionele groep verleent de molecule zure eigenschappen (zie lager).

De belangrijkste families zijn in Tabel 7.2 weergegeven. R en R' (en R'') staan voor koolstofketens die gelijke maar ook heel verschillende vorm kunnen hebben. Bij R<sub>3</sub>-N bij amines kunnen de drie R-groepen ook verschillend zijn: R-N(-R'')-R'. **De algemene structuurformule van de families kennen is belangrijk!**

Bij elke familie (met kenmerkende functionele groep) hoort een kenmerkende uitgang: ofwel een suffix/achtervoegsel (bijb. stamnaam + -al voor aldehyden) en in een aantal gevallen een prefix(voorvoegsel): bijv. amino- +stamnaam (zie meer uitgebreid in diareeks). Dit is van belang voor de naamgeving van organische moleculen waarin meer dan één functionele groepen voorkomen. Dan geldt de prioriteit opgelijst in **bijlage 6**. Een functionele groep met een hogere prioriteit levert het suffix in de naam, deze met de lagere functionaliteit levert het achtervoegsel. Bijv. aminocarbonzuur of haloalkaan.

Tabel 7.2			
			
FAMILIE	Functionele groep	Algemene STRUCTUUR	naam
ALKANEN	-	$R-H$	Stamnaam+ aan
ALKENEN	minstens 1 $C=C$	$R-CH=CH-R'$	Stamnaam+ een
ALKYNEN	minstens 1 $C\equiv C$	$R-C\equiv C-R'$	Stamnaam+ yn
HALO-ALKANEN	minstens 1 F, Cl, Br of I gebonden op C-keten	$R-X$	Fluor, Chloor, Broom, Jood + stamnaam
ALCOHOLEN	Minstens 1 OH-groep	$R-OH$	Stamnaam + ol
ETHERS	Minstens 1 O-atoom enkelvoudig gebonden op 2 C-atomen	$R-O-R'$	Alkoxy + stamnaam of stamnaam + ether
AMINES	Minstens 1 N-atoom enkelvoudig gebonden op C	$R-NH_2$ $R-NH-R'$ $R_3-N$ of $R-N(-R'')-R'$	Amino+stamnaam of stamnaam + amine
ALDEHYDEN	Met carbonylfunctie op laatste C van de keten	$\begin{array}{c} O \\    \\ R-C-H \end{array}$ of $R-CHO$	Stamnaam + al
KETONEN	Met carbonylfunctie	$\begin{array}{c} O \\    \\ R-C-R' \end{array}$ of $R-CO-R'$	Stamnaam + on
CARBONZUREN	Met carboxylgroep	$\begin{array}{c} O \\    \\ R-C-OH \end{array}$ of $R-COOH$	Stamnaam + carbonzuur
ESTERS		$\begin{array}{c} O \\    \\ R-C-OR' \end{array}$ of $RCOOR'$	Alkyl...anoaat
AMIDES		$\begin{array}{c} O \\    \\ R-C-NH_2 \end{array}$ $RCONH_2$	Alkyl...amide
ZUURCHLORIDEN		$\begin{array}{c} O \\    \\ R-C-Cl \end{array}$	carbonylzuurchloride
FOSFAATESTERS		$\begin{array}{c} O \\    \\ R-P-OR' \end{array}$	

## 7.5 POLARITEIT VAN ORGANISCHE VERBINDINGEN – FYSISCHE EIGENSCHAPPEN

Organische verbindingen bevatten per definitie hoofdzakelijk C en H. Dit betekent dat ze vooral C-C en C-H-bindingen bevatten (functionele groepen niet in beschouwing genomen). Deze bindingen zijn respectievelijk niet en heel weinig gepolariseerd. De elektronegativiteit EN van C en H verschilt slecht 0,35 (zie Bijlage §13.2.2, §2.4). Het koolwaterstofskelet draagt dus maar heel weinig bij tot de polariteit van organische moleculen.



Het **nettodipoolmoment**  $\mu_{\text{netto}}$  van organische verbindingen is **0 of heel klein** (Tabel 7.3). In een aantal organische moleculen die symmetrisch zijn opgebouwd als men hun ruimtelijke geometrie bekijkt (bijv. alkanen,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CCl}_4$ ) heffen de dipoolmomenten van de bindingen elkaar volledig op (zie ook hoofdstuk 2, §2.6.4, zie ook verder hoofdstuk 8) en is het nettodipoolmoment 0.

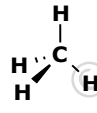
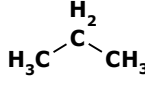
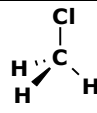
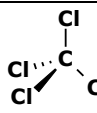
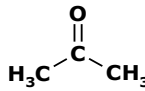
Moleculen met nettodipoolmoment 0 zijn **apolair**.

De zwakke **Londonkrachten** (geïnduceerde dipool-dipoolkracht, §3.2.2) zijn de enige **intermoleculaire aantrekkingskrachten** die werkzaam zijn tussen apolaire moleculen.

Apolaire moleculen (koolwaterstoffen zoals alkanen, alkenen, alkynen, ...) hebben als gevolg van de zwakke intermoleculaire aantrekkingskracht **relatief hoge dampdrukken en relatief lage kookpunten**. Deze nemen wel toe met stijgend molecuulgewicht en eveneens met stijgende grootte van het contactoppervlak tussen de moleculen onderling (zie polariseerbaarheid in H3 §3.2.2., vgl. methaan en propaan in Tabel 7.3, zie ook Hoofdstuk 8-9). Ze zullen **slecht mengen** met het polaire solvent water.

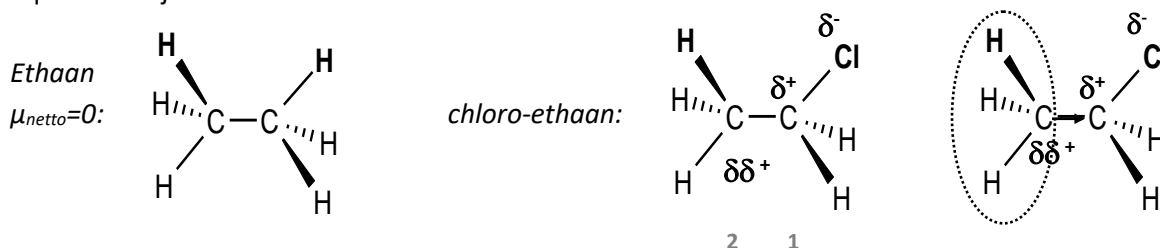
(voor verbanden: zie Deel I, hoofdstuk 2, §2.6.4, hoofdstuk 3, §3.3.4.2-3, Hoofdstuk 4, §4.3.2 ).



Tabel 7.3					
Formule	Structuur/geometrie rond centrale C	Naam	Nettodipoolmoment $\mu_{\text{netto}}$	Molecuulgewicht (a.m.e.)	Kookpunt (°C)
$\text{CH}_4$	 tetraheder	methaan	0,0	16	-162
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$	 tertaheder	propaan	<b>0,0</b>	<b>55</b>	<b>-42</b>
$\text{CH}_3\text{Cl}$	 tetraheder	methylchloride	<b>1,9</b>	<b>50</b>	<b>-24</b>
$\text{CCl}_4$	 tetraheder	tetrachloor-methaan	0,0	152	77
$\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$	 trigonaal planiair	aceton	<b>2,7</b>	<b>58</b>	<b>56</b>

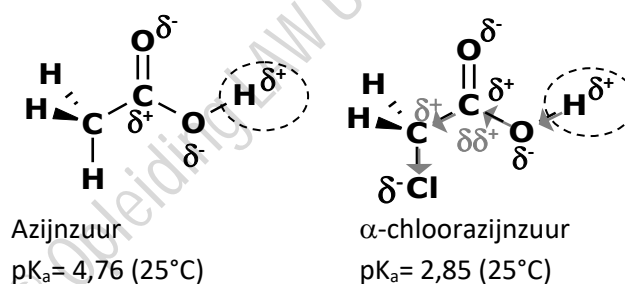


Voorbeeld 1: In ethaan is de C-C-binding volledig apolair waardoor de twee C-atomen volkomen equivalent zijn.



In chloro-ethaan echter is de C-Cl-covalente binding gepolariseerd ( $\mu_{\text{bind}} > 0$ ): Het C-1 koolstof (nummering onder molecule) is daardoor partiëel positief  $\delta^+$ . C-1 compenseert het tekort aan elektronen door de elektronen van de C1-C2-binding naar zich toe te trekken waardoor C-2 eveneens, hoewel in mindere mate, partiëel positief ( $\delta\delta^+$ ) wordt. Men kan dit interpreteren alsof de  $\text{CH}_3$ -groep (omcirkeld in rechtse molecule) een 'elektron-gevende of -duwende' capaciteit heeft.

Voorbeeld 2: Chloorazijnzuur is een minder zwak zuur (hogere  $K_a$  waarde, lagere  $\text{p}K_a$  waarde, zie Hoofdstuk 6) dan azijnzuur omwille van het **elektronzuigend effect** (aangegeven met grijze pijltjes) geïnduceerd door het sterk electronegatieve Cl-atoom. Dit effect manifesteert zich ter hoogte van het H-atoom (omcirkeld) dat als  $\text{H}^+$  zal worden afgescheiden bij reactie van het zuur in water. Het inductief effect heeft dus ook een effect op de chemische reactiviteit.



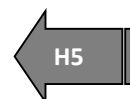
Terminologie: Alle atomen of atoomgroepen die sterker bindingselektronen aantrekken dan waterstof worden **elektronzuigend** genoemd en alle atomen of atoomgroepen die minder sterk elektronen aantrekken dan waterstof zijn **elektronduwend**.

## 7.7 CHEMISCHE REACTIES TUSSEN ORGANISCHE VERBINDINGEN

Daar de organische chemie gedeeltelijke apart ontwikkeld is, is hierin een specifieke indeling van de reactietypes gebeurd. Men spreekt niet van een reactie tussen twee reagentia maar tussen een **substraatmolecule** en **reagens** waarbij het substraat de koolwaterstofmolecule is met de koolstofketen of –ring en functionele groepen. De molecule, het ion of radicaal die met het substraat reageert noemt men reagens. Men onderscheidt de verschillende types reacties in functie van wat gebeurt met het substraat als volgt:

- **Substitutiereacties:** reacties waarin atomen of atoomgroepen die op koolstof gebonden zijn in de substraatmolecule worden vervangen door een ander atoom of atoomgroep.
- **Additiereacties aan dubbele of driedubbele bindingen** in een substraatmolecule: reacties waarin extra atomen of groepen covalent gekoppeld worden op een oorspronkelijk meervoudig gebonden koolstof in de substraatmolecule.
- **Eliminatiereacties:** reacties waarin atomen of atoomgroepen die op koolstof gebonden zijn in de substraatmolecule, worden verwijderd.

Bij chemische reacties worden steeds covalente bindingen in de reagentia verbroken of gesplitst en nieuwe bindingen gevormd resulterend in de producten (zie Hoofdstuk 5, Deel I).



Bij de vorming van een nieuwe covalente binding tussen een reagens en een substraatmolecule kan een reagens ofwel een elektronenpaar naar het substraat brengen ofwel neemt het er een van weg. Dergelijke reagentia worden respectievelijk een **nucleofiel (Nu<sup>-</sup>)** en een **elektrofiel (E<sup>+</sup>)** genoemd. Tabel 7.6 toont voorbeelden van beide types reagentia.



### Terminologie:

Een **nucleofiel** is 'kern-minnend', brengt een elektronenpaar aan en reageert (= vorming van een nieuwe covalente binding) doorgaans met een (partiël) positief deel (+ of  $\delta^+$ ) van het substraat.

Een **elektrofiel** heeft een elektrontekort (er is plaats voor een elektronenpaar in de valentieschaal); het is dus elektron-minnend en reageert (= vorming van een nieuwe covalente binding) doorgaans met een (partiël) negatief deel (- of  $\delta^-$ ) van het substraat.

Nucleofielen	Nucleofielen	Elektrofielen
HO <sup>-</sup>	H <sub>2</sub> O	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>
RO <sup>-</sup>	ROH	H <sup>+</sup>
RS <sup>-</sup>	NH <sub>3</sub> of NH <sub>2</sub> R ...	Br <sup>+</sup>
F <sup>-</sup> , Cl <sup>-</sup> , Br <sup>-</sup> , I <sup>-</sup>	CN <sup>-</sup>	

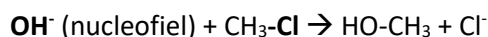
In de nucleofiele reacties door H<sub>2</sub>O en ROH is het elektronenpaar dat gebruikt wordt voor de nieuwe covalente binding met de substraatmolecule het vrij elektronepaar op het O-atoom. Analogie is dit in NH<sub>3</sub> of een amine het vrije elektronepaar op het N-atoom.

Bij substitutie- en additiereacties kan de reactie in gang gezet worden ofwel door een nucleofiel ofwel door een elektrofiel. Op basis daarvan onderscheidt men:

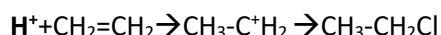
- nucleofiele substitutiereactie
- elektrofiel substitutiereacties
- nucleofiele additiereacties
- elektrofiel additiereacties



Voorbeeld 1 Nucleofiele substitutiereactie:



Voorbeeld 2 Elektrofiel additie: reactie met HCl (= H<sup>+</sup> + Cl<sup>-</sup>), in de eerste stap bindt het elektrofiel H<sup>+</sup> op C-atoom van de dubbele binding in het substraat.



Zie ook voorbeelden in Hoofdstuk 8 en 9.

Uit het voorbeeld voor elektrofiel additie volgt dat sommige reacties in twee stappen verlopen. **Meerstapsreacties** komen veel voor in organische chemie. Bij een meerstapsreactie worden, voordat de producten gevormd worden, **tussenproducten of intermediaren** (bijv. CH<sub>3</sub>-C<sup>+</sup>H<sub>2</sub> in voorbeeldreactie 2) gevormd.

De levensduur van deze tussenproducten is heel kort, soms maar 10<sup>-12</sup> s: ze reageren dus heel vlug verder. Kennis van deze intermediaren en dus van het exacte reactiemechanisme is echter belangrijk om voor een specifieke reactie te kunnen verklaren waarom een bepaald product bij voorkeur gevormd wordt of een waarom een mengsel van verschillende producten gevormd wordt onder welbepaalde reactiecondities (zie hoofdstuk 8).

## 7.8 OEFENINGEN OP VOORSTELLINGSWIJZEN VAN KOOLWATERSTOFVERBINDINGEN



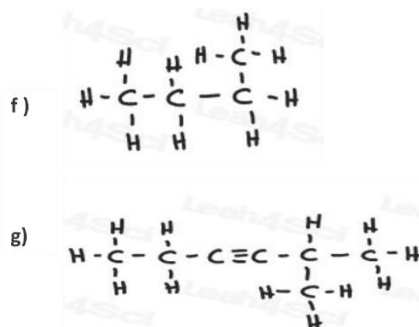
Oefeningen overgenomen van

<http://leah4sci.com/drawing-skeletal-structures-practice-quiz/> Copyright leah4sci

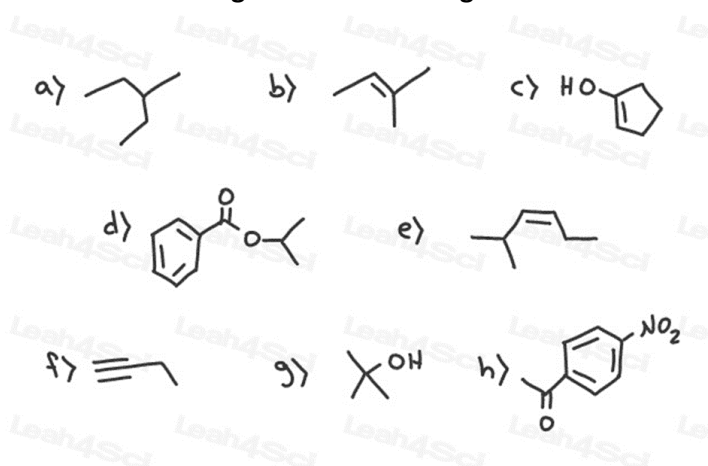
© 2018

1. Geef van onderstaande organische verbindingen de zaagtand- of skeletnotatie

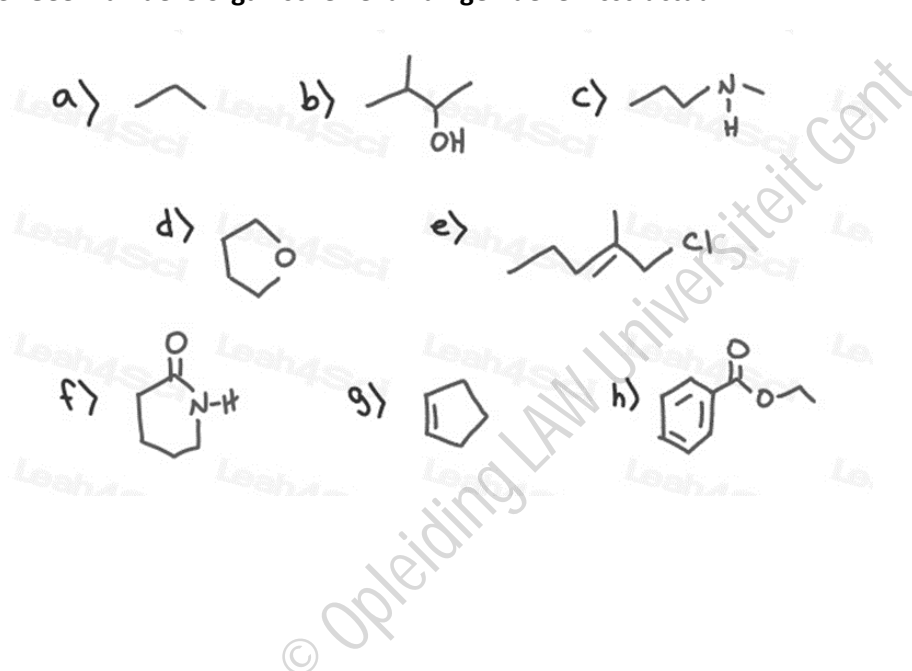
- a) CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>CH<sub>3</sub>  
 b) CH<sub>3</sub>CHBrCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>  
 c) (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>CCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>  
 d) CH<sub>3</sub>CHCHCH<sub>2</sub>CHCH<sub>2</sub>  
 e) CH<sub>3</sub>COCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>



## 2. Geef van deze organische verbindingen de brutoformule



## 3. Geef van deze organische verbindingen de lewisstructuur



## 7.9 OBJECTIEVEN (CHECKLIST)


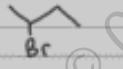
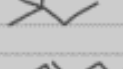
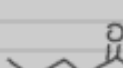
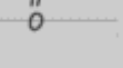

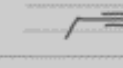
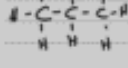
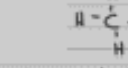
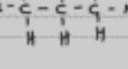
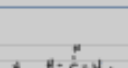



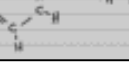


- Je kunt de bindingswijzen van C (enkelvoudig, dubbel, driedubbel) en hun sterisch getal koppelen aan de hybridisatietoestand van de betrokken C-atomen. Je kent de geometrie rond een C-atoom dat in  $sp^3$ ,  $sp^2$  of in  $sp$ -hybridisatie is (op basis van VSEPR en op basis van de vorm van hybride-orbitalen) (Figuur 7.2 A,B,C)
- Je kent de rotatievrijheid of flexibiliteit rond C-C-bindingen wanneer de C-bindingen ofwel enkelvoudig, dubbel, driedubbel. Je kunt dit terugkoppelen naar de specifieke overlap tussen de hybride-orbitalen (s en p) van de twee op elkaar gebonden C-atomen. Je kent in functie hiervan de begrippen  $\sigma$  (sigma) en  $\pi$  (pi)-bindingen. Je kunt dit alles gebruiken in verklaringen van de fysische (kookpunt bijv.) en chemische eigenschappen (additie-reacties) van bepaalde organische verbindingen (zie bijv. Deel II, hoofdstuk 8 en 9)
- Je kunt de **verschillende voorstellingswijzen** van organische moleculen vlot gebruiken en interpreteren. Je kent de stamnamen voor ketenlengtes tot 10. Je weet dat 'R-' staat voor een 'alkyl'-groep.



- Je kent de conceptuele basis van de indeling van organische verbindingen in verschillende families: i.e. op basis van het voorkomen van verschillende functionele groepen.
- **Je kent de verschillende families uit Tabel 7.2 en hun karakteristieke functionele groep met naam en algemene voorstelling (bijv. ROH voor alcoholen, zie ook meer in detail Deel II hoofdstuk 8 en 9).**
- Je kunt algemene uitspraken doen over het (a)polair karakter van organische verbindingen en het effect hiervan op de fysische en chemische eigenschappen van organische moleculen (uiteraard: **zie additionele toepassingen in Deel II hoofdst 8 en 9**).
- Je kent het mogelijk effect van elektronenzuigende groepen in organische verbinding op de chemische eigenschappen van de verbinding (additionele vbn. in hoofdstuk 9).
- Je kent de begrippen: koolstof(hoofd)keten, koolstofzijketen of vertakking, functionele groep, alkylgroep, polair, apolair, hydrofiel, hydrofoob, amfifatisch, elektronenzuigende groep, (elektronenduwende groep, inductief effect), nucleofiel (met vbn.), elektrofiel (met een vb.), substitutie-, additie- en eliminatiereactie.

### BIJ § 7.8 OPLOSSINGEN 1-3

<p>a) </p> <p>b) </p> <p>c) </p> <p>d) </p> <p>e) </p> <p>f) </p> <p>g) </p>	<p>a) <math>C_6H_{14}</math>  b) <math>C_5H_{10}</math>  c) <math>C_5H_{12}O</math>  d) <math>C_{10}H_{12}O_2</math>  e) <math>C_7H_{14}</math>  f) <math>C_4H_6</math>  g) <math>C_4H_{10}O</math>  h) <math>C_8H_7NO_3</math></p>	<p>a) : </p> <p>b) : </p> <p>c) : </p> <p>d) : </p> <p>e) : </p> <p>f) : </p> <p>g) : </p> <p>h) : </p>
<p>Copyright Leah4Sci © 2018  <a href="http://leah4sci.com/drawing-skeletal-structures-practice-quiz/">http://leah4sci.com/drawing-skeletal-structures-practice-quiz/</a></p>		

<i>Bijlage 6</i> Prioriteitslijst van functionele groepen
---

Slecht een selectie van functionele groepen is getoond (in deze syllabus behandeld).

De lijst is geordend van hoge naar lage prioriteit.

Wanneer ze samen voorkomen levert de groep met hoogste prioriteit het achtervoegsel.

	Groep	Formule	Achtervoegsel	Voorvoegsel
1	Carbonzuur	R-COOH	-zuur	carboxy
2	Ester	R-CO-O-R	-oaat	geen
3	Zuurchloride	R-CO-Cl	zuurchloride	
4	Amide	R-CONH <sub>2</sub>	-amide	geen
5	Aldehyde	R-CHO	-al	formyl
6	Keton	R-CO-R	-on	oxo
7	Alcohol	R-OH	-ol	hydroxy
8	Thiol	R-SH	-thiol	mercapto
9	Amine	R-NH <sub>2</sub>	-amine	amino
10	alkeen		een	alkenyl
11	alkyn		yn	alkynyl
12	alkaan		aan	alkyl
13	Ether	R-O-R	-ether	oxy
14	Haloalkaan	R-X	(halide)	Halogeen: (fluor-, chlor-, broom-,

# Deel III

## De chemische basis van leven

1. Suikers: bouwstenen van polysacchariden
2. Nucleotiden: bouwstenen van genetisch materiaal
3. Amino-zuren: bouwstenen van eiwitten
4. Lipidemoleculen: onderdeel van vetreserve en celmembraan

Structuren in dit deel III dien je niet te kunnen reproduceren; enkel te kunnen 'lezen' in functie van de kennis uit deel I en II

- Dragen ze polaire groepen?
- Zullen ze met watermoleculen kunnen associëren (via H-bruggen of andere zwakke krachten); zullen ze oplossen in water?
- Kunnen ze onderling IMK aangaan? Welke?
- Welke functionele groepen dragen ze?
- Volgens welke uit deel II gekende chemische eigenschappen binden bouwstenen op elkaar?

1. Suikers bouwstenen van polysacchariden
2. Nucleotiden bouwstenen van genetisch materiaal
3. Amino-zuren bouwstenen van eiwitten

<b>Biomoleculen (macromoleculen)</b>	<b>Bouwsteen (monomeer, <u>covalent</u> gebonden)</b>
<b>Eiwitten</b>	→ Alfa-aminocarbonszuren (aminozuren)
<b>Polysacchariden</b>	→ Monosacchariden (eenvoudige suikers)
<b>Nucleïnezuren DNA/RNA (erfelijk materiaal)</b>	→ Nucleotiden (suiker + base + fosfaatgroepen)

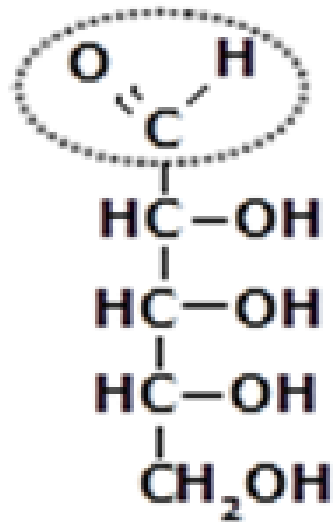
4. Lipidemoleculen, onderdeel van vetreserve en celmembraan

# 1. Suikers

© Opleiding Law Universiteit Gent

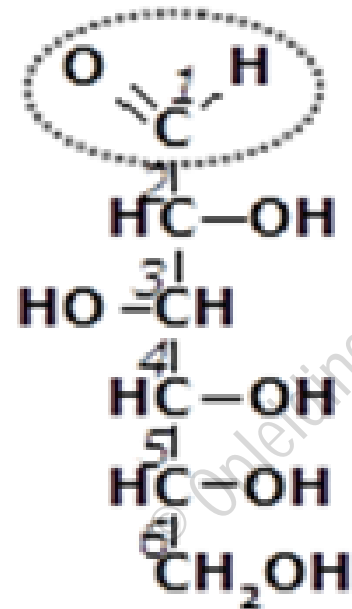
# Bouwsteen: monosacchariden of eenvoudige suikers (brutoformule $C_nH_{6n}O_n$ )

aldopentose

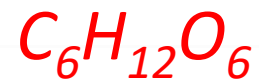


**Ribose**

aldohexose



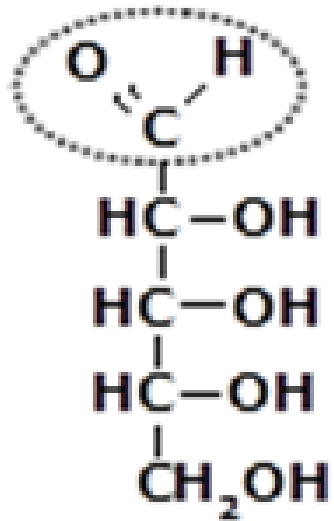
**Glucose**



© Onlezing LAW Universiteit Gent

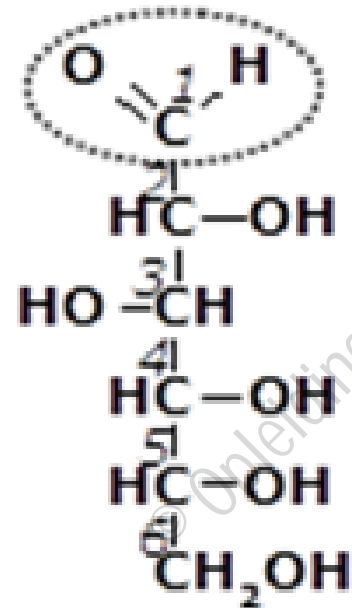
# Bouwsteen: monosacchariden of eenvoudige suikers (brutoformule $C_nH_{6n}O_n$ )

aldopentose

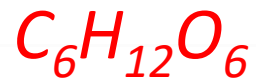


**Ribose**

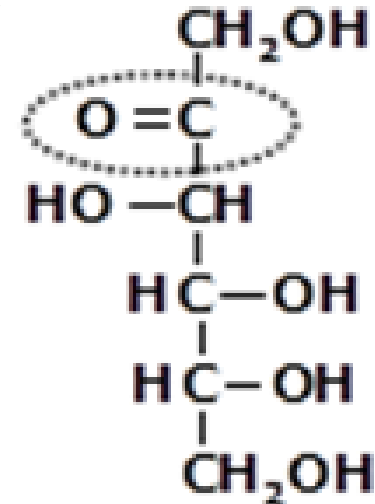
aldohexose



**Glucose**



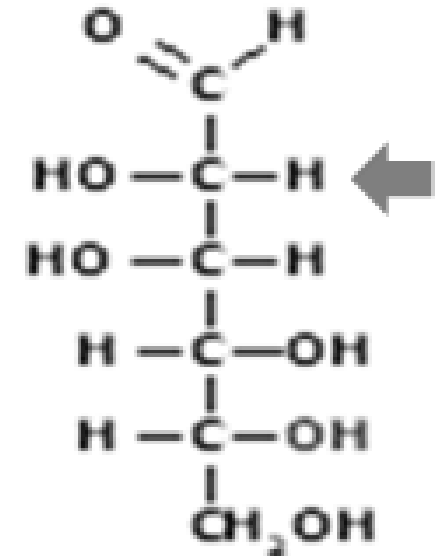
ketohexose



**Fructose**



aldohexose



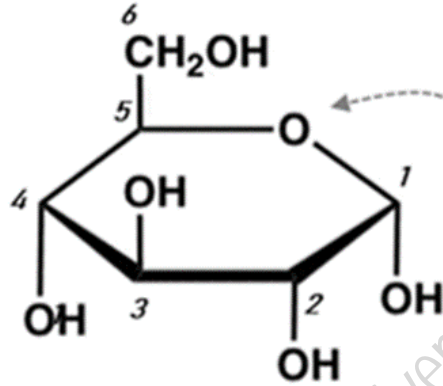
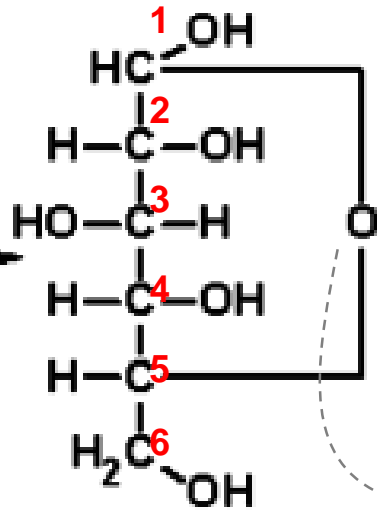
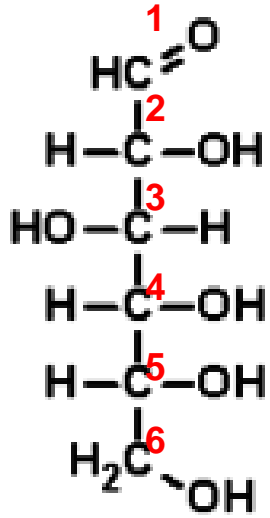
**Mannose**



**A**

Fischerprojectie (open)

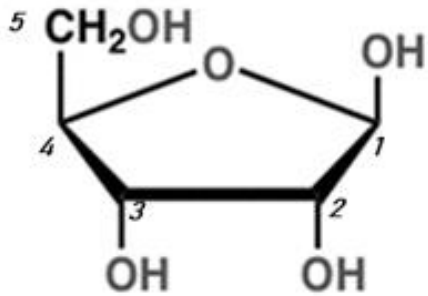
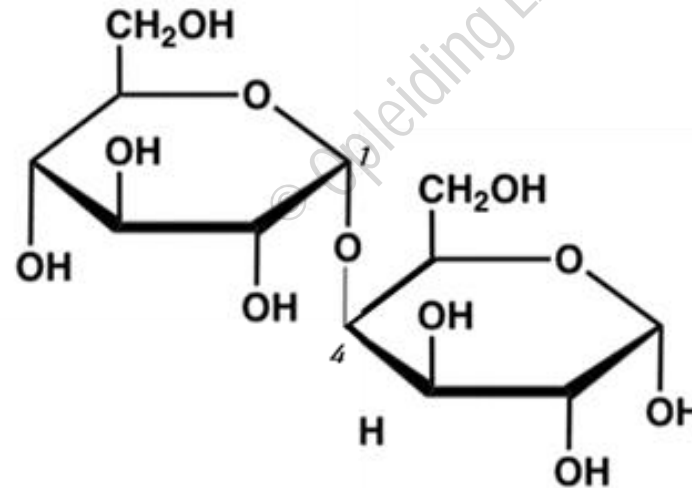
Haworthvoorstelling (cyclisch)

**A en B**

In natuurlijk processen is de meest voorkomende vorm van de monosacchariden een cyclische vorm

Getoond voor glucose in A en voor ribose in B

De nummering start bij het C-atoom dat in open vorm de carbonylfunctie draagt

**B****C**

**C : Covalente koppeling tussen suikerbouwstenen levert disacchariden**

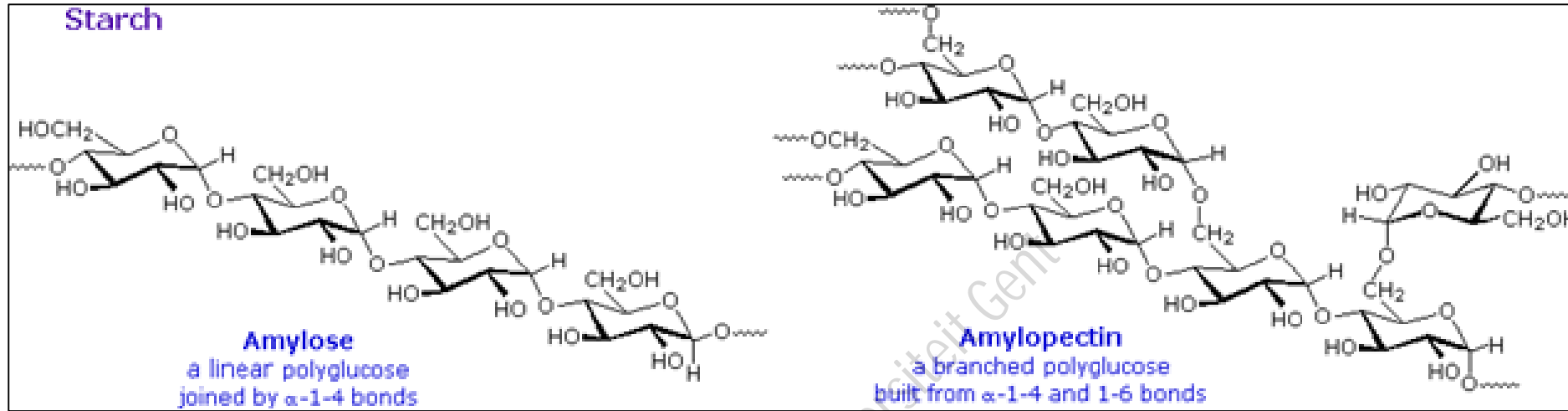
C toont maltose dat bestaat uit 2 glucosemoleculen; hier is de koppeling 1→4

Ook koppelingen C1→1 of C1→6 zijn mogelijk. Deze koppelingen worden O-glycosidische bindingen genoemd.

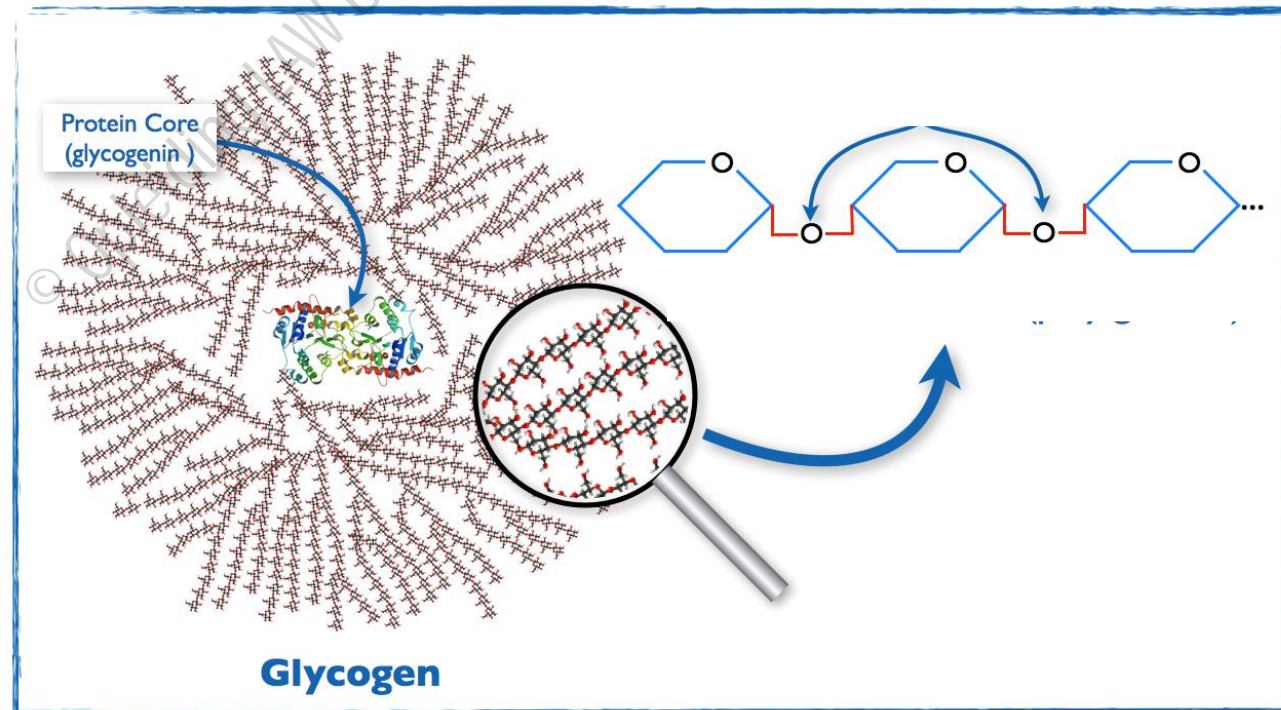
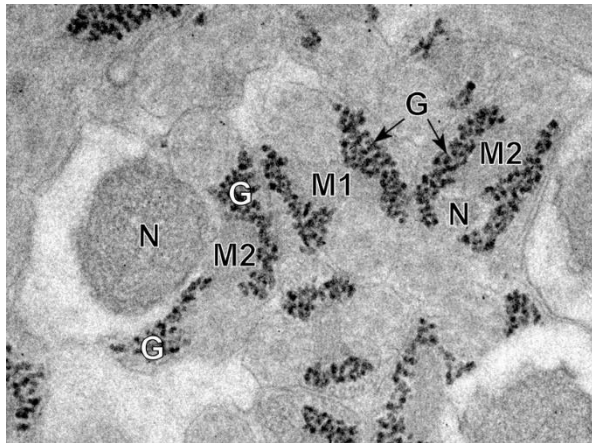
In polysacchariden zijn biopolymeren van suikermoleculen (vertakt of onvertakt)



# Zetmeel



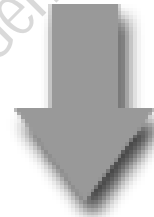
# glycogen



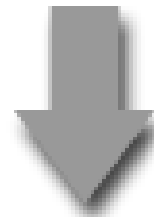
Ter info

## 2. Vier Nucleotide bouwstenen

DNA



RNA

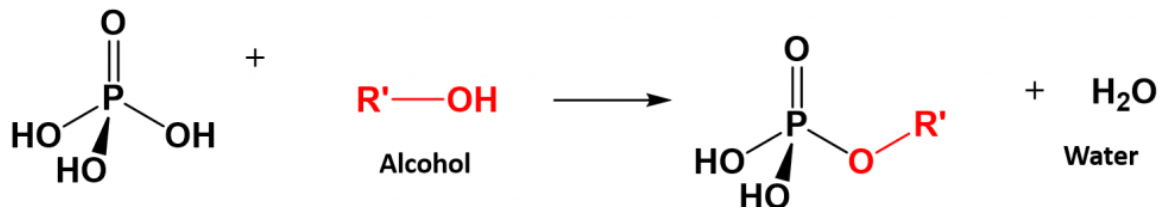


Protein

Unieke sequentie van nucleotidebouwstenen

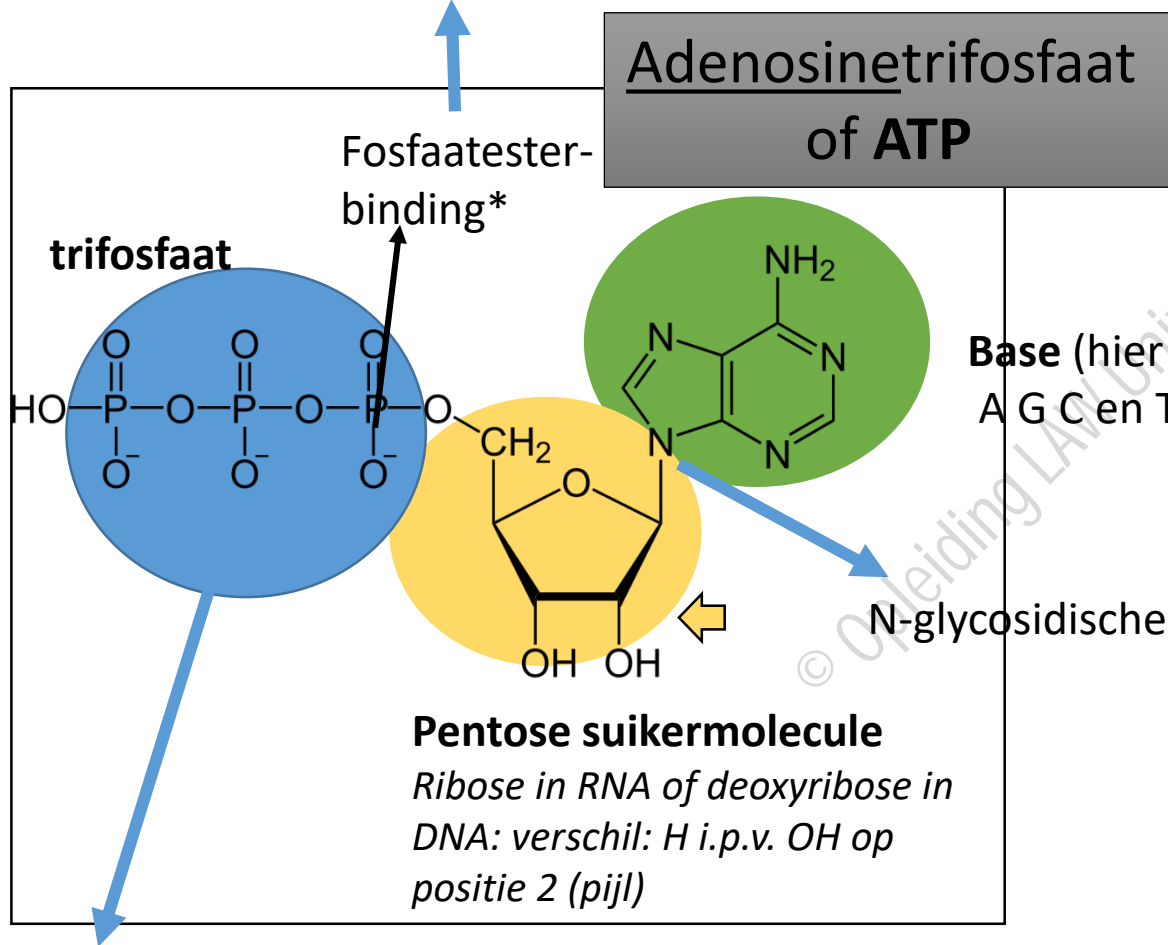
Afschrift (kopij) met overeenkomstige unique sequentie van nucleotide bouwstenen

Unieke volgorde van aminozuurbouwstenen  
CODE: elk aminozuur komt overeen met een triplet van nucleotiden

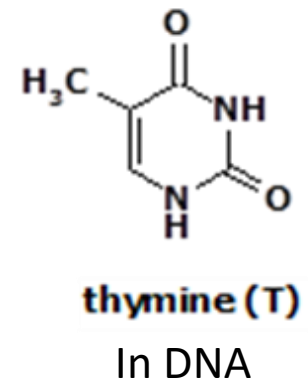
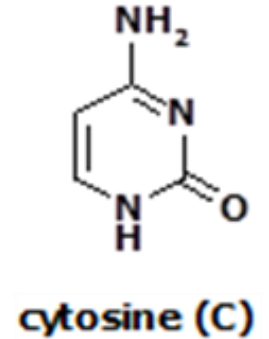
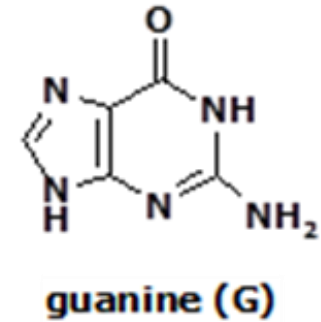
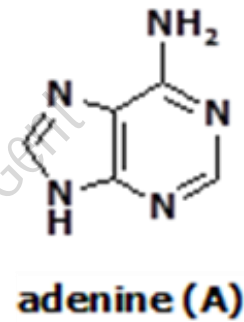


\* Vorming van een **fosfo-esterbinding** (analoog aan esterbinding maar met fosforzuur + alcohol i.p.v. carbonzuur plus alcohol, zie hoofdstuk 9)

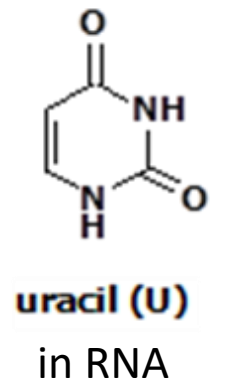
**Nucleotide-bouwsteen**



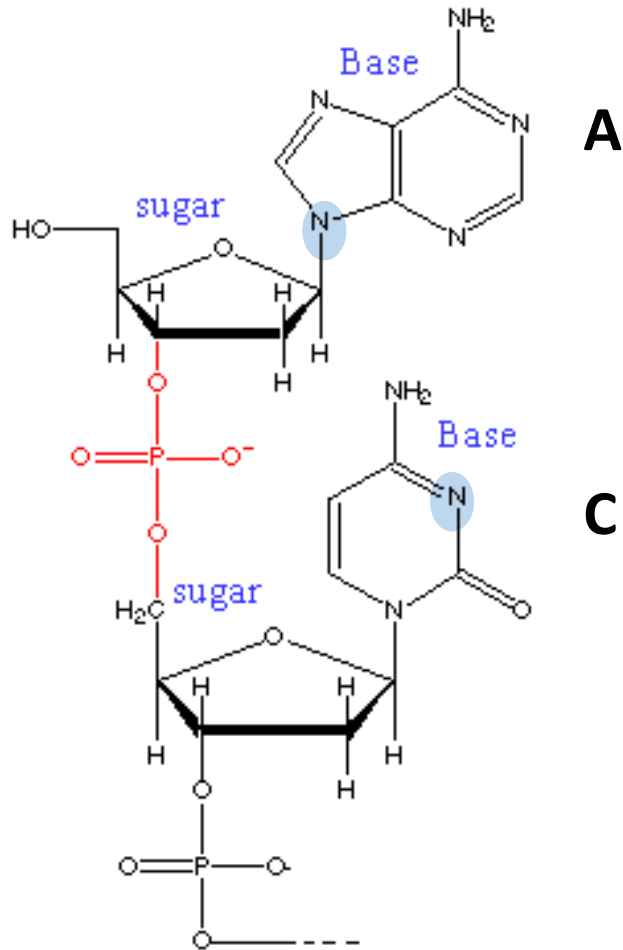
*Negatieve ladingen bij fysiologische pH (7.3)*



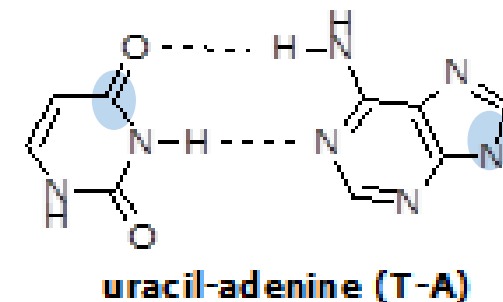
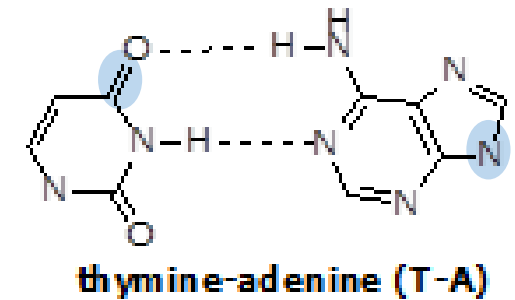
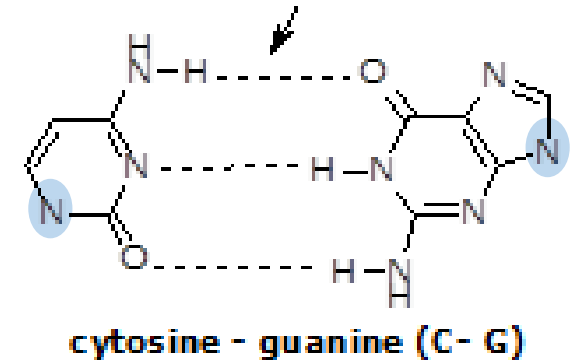
of



# Nucleotidebiopolymeer: covalent gebonden nucleotiden in welbepaalde unieke volgorde



# Tussen de basen in twee nucleotidebiopolymeren treden op heel specifieke wijze H-bruggen op (2 of 3)



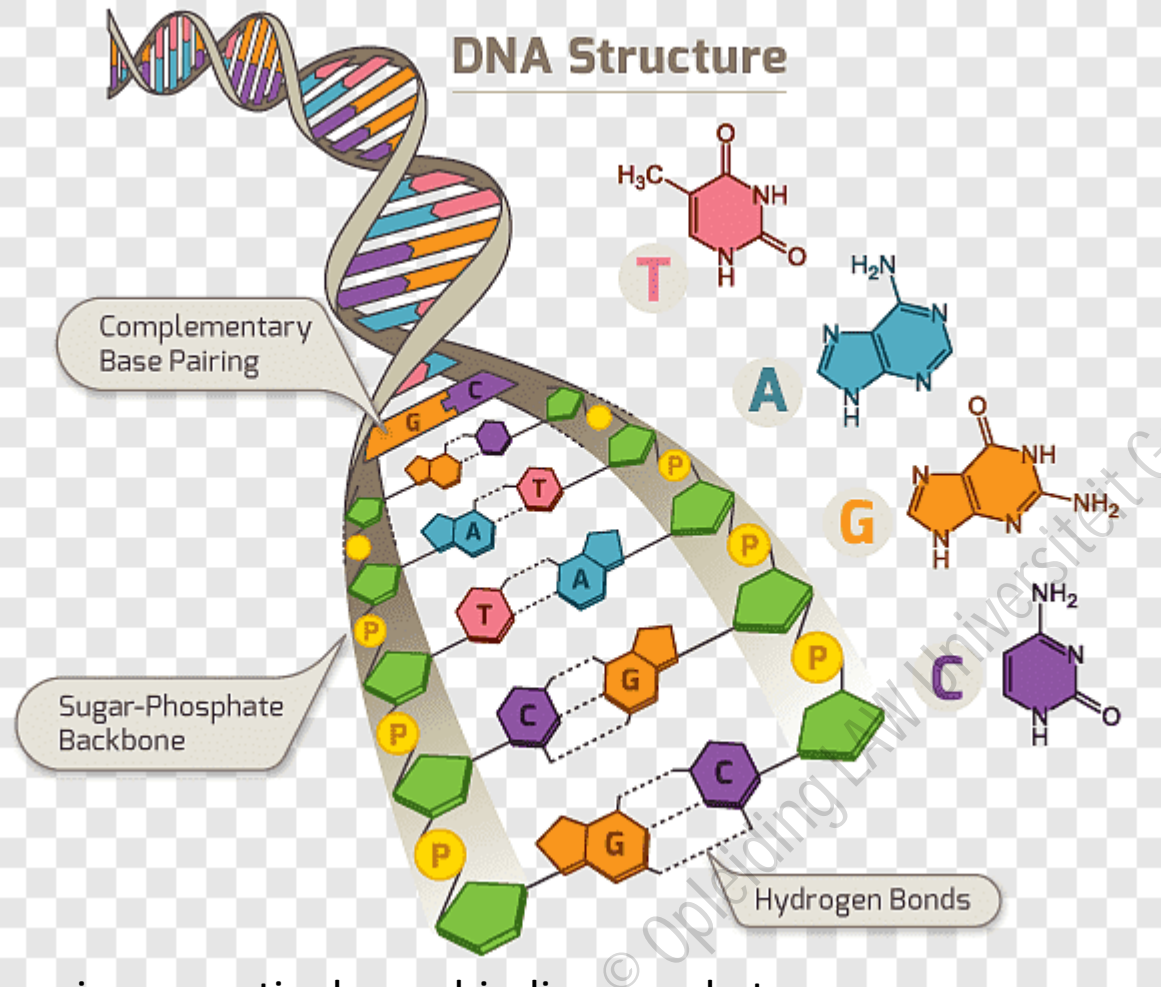
Complementaire H-brugvorming

**ATCGATGCTAA**

**TAGCTACGATT**

*Drie nucleotide: één codon*

*Info voor één aminozuur bij eiwitvorming*



H-brugvorming essentieel voor binding van de twee DNA polymeren in de dubbelhelix; en voor correct openen en sluiten van de dubbelhelix

H-bruggen essentieel voor vorming van het correcte RNA afschrift



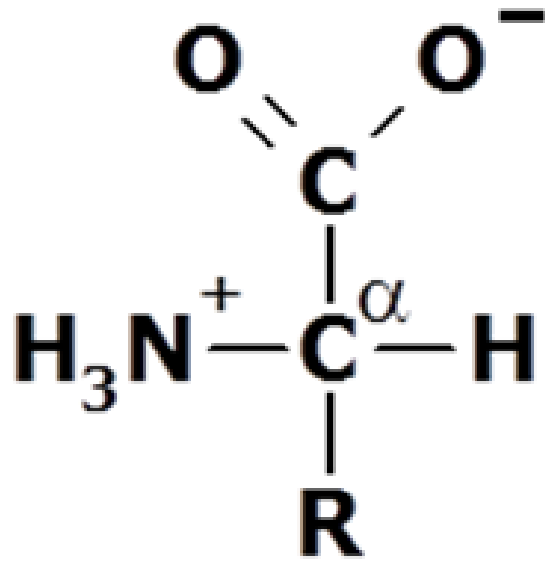
Unieke sequentie van nucleotidebouwstenen

Afschrift (kopij) met overeenkomstige unieke sequentie van nucleotide bouwstenen

Unieke volgorde van aminozuurbouwstenen  
CODE: elk aminozuur komt overeen met een triplet van nucleotiden

# 3. 20 aminozuur- bouwstenen

# Basistructuur van aminozuur



Bij fysiologische pH (7,3) is:

- de carboxylfunctie in de basische carboxylaatform (negatieve lading)
- De aminefunctie in zure vorm (positieve lading)

**De R-groep of zijketen verschilt in de 20 bouwstenen.**

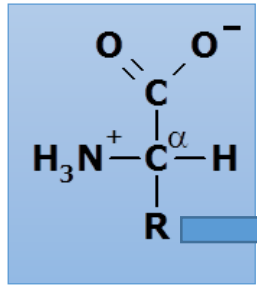
Elk aminozuur naam bijv. Glutaminezuur een afkorting bijv. Glu en lettercode bijv. E

Alanine (Ala, A) is aminozuur waarbij  $\text{R} = -\text{CH}_3$

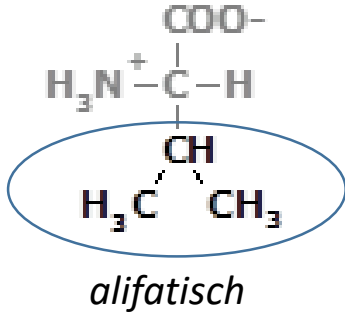
**De zijketen geeft aan elk aminozuur specifieke eigenschappen qua polariteit en bijgevolg mogelijkheid tot vorming van zwakke krachten of ionbindingen**

Basis bij pH 7,3

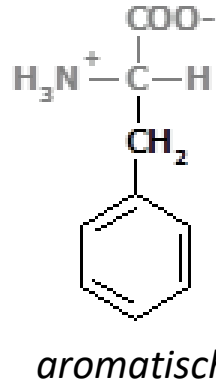
Aminoszuren met apolaire zijketen



**valine Val V**



**fenylalanine Phe F**

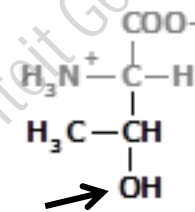


Aminoszuren met polaire zijketen

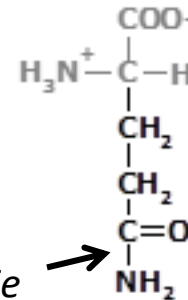
Neutraal (= geen lading)

polair

**threonine Thr T**

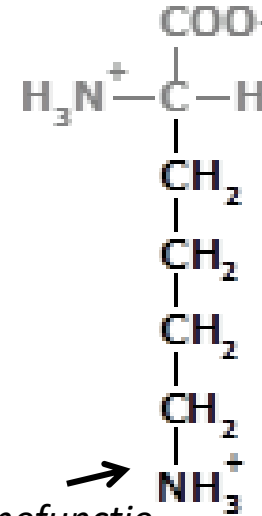


**glutamine Gln Q**



Basisch (+) polair

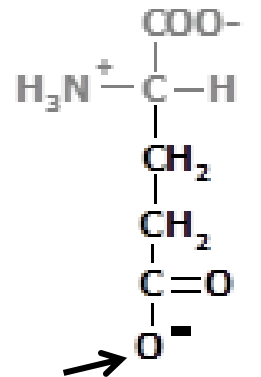
**lysine Lys K**



positieve lading

Zuur (-) polair

**glutaminezuur Glu E**



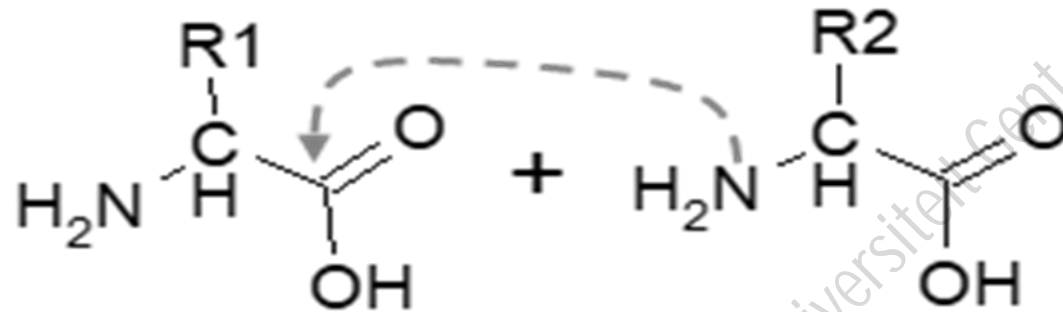
negatieve lading

Structuren van alle 20 aminoszuren op ufora

© Opleiding LAW Universiteit Gent

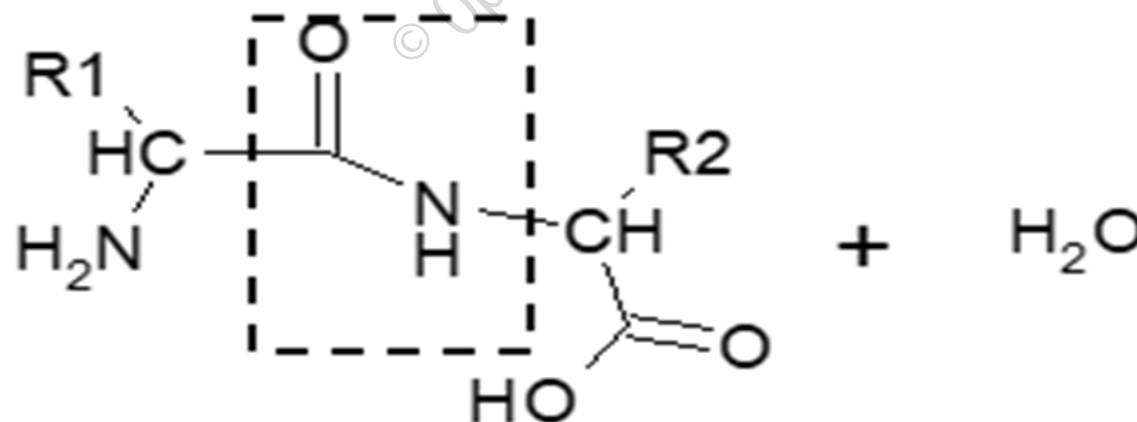


# Eiwitten zijn biopolymeren van aminozuren

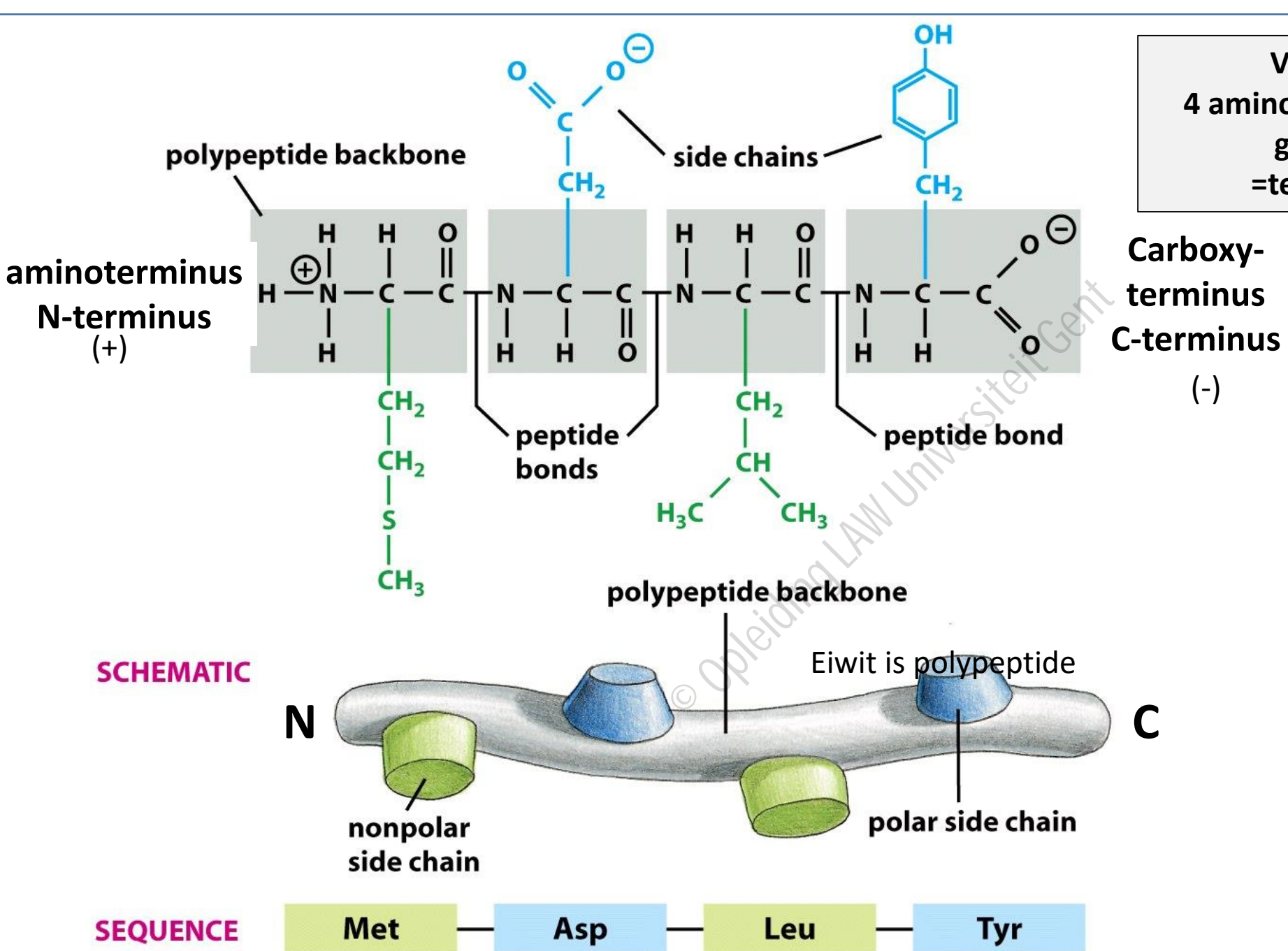


**Peptidenbinding**  
**Amidebinding**

De koppeling is de vorming van een amidebinding tussen carboxylgroep van aminozuur 1 en aminegroep van aminozuur 2



Zie ook deel II



Voorbeeld:  
4 aminozuren op elkaar  
gekoppeld  
=tetrapeptide

## Eiwitten

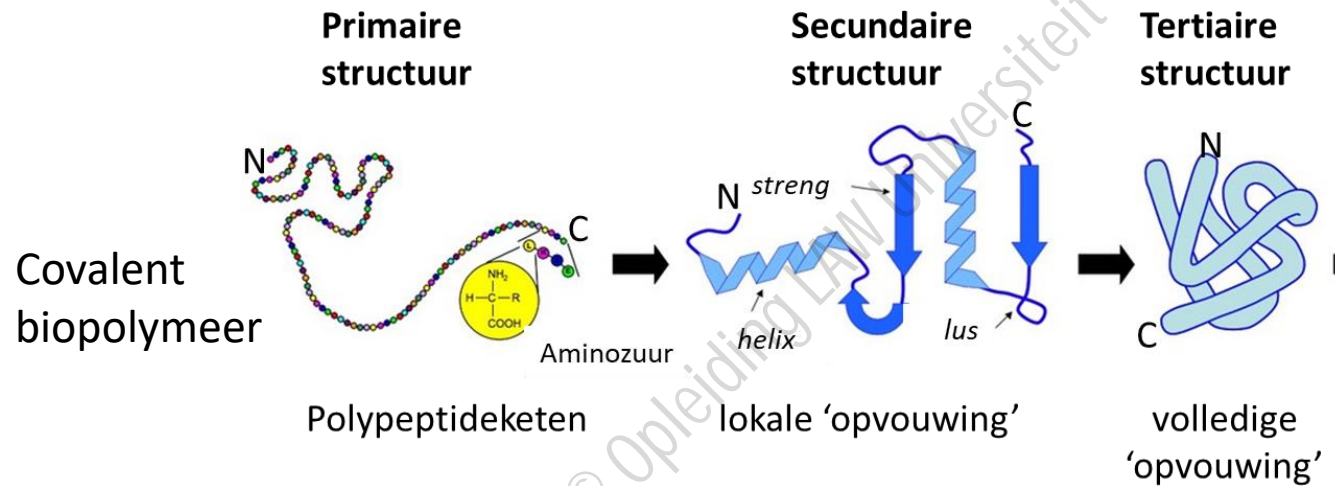
zijn polypeptiden met 50-1000-den aminozuren  
Elk eiwit heeft een unieke volgorde van aminozuren

- Bijv. elk antilichaam bestaat uit:
- vier polypeptideketens
  - twee van ~500 aminozuren
  - twee van ~210 aminozuren

Eiwitten = proteïnen:

Elk eiwit heeft een **unieke genetisch bepaalde aminozuursequentie of primaire structuur**

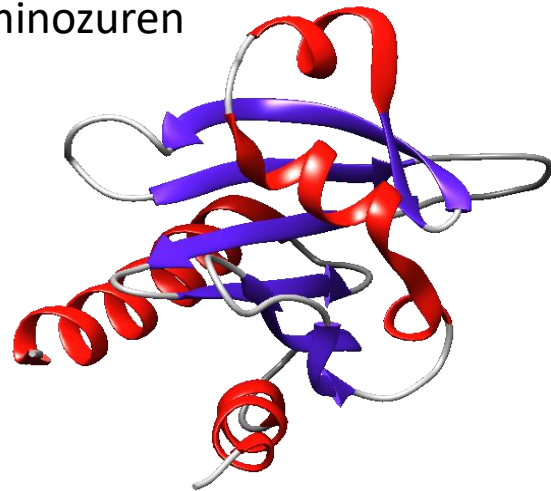
**Deze primaire structuur bepaalt de finale 3D structuur (= vorm = architectuur)**



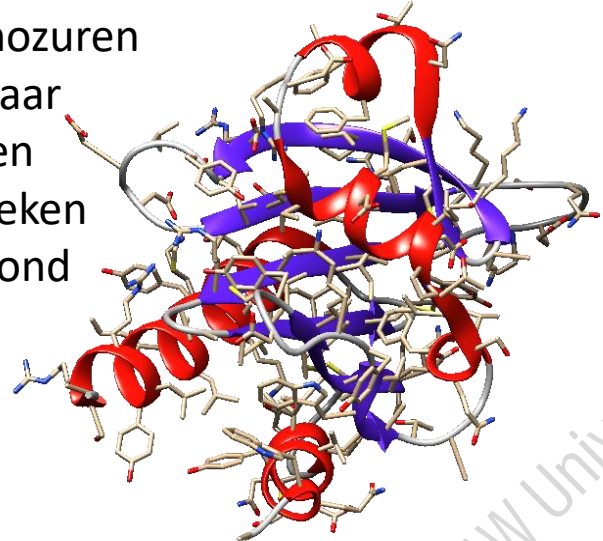
Opvouwing grotendeels gebaseerd op:

- Zwakke krachten tussen NH en CO van peptidebinding (sec. structuur)
- Zwakke krachten tussen functionele groepen op de zijketen (tertiaire structuur)

Vorm van de opgevouwen keten van aminozuren



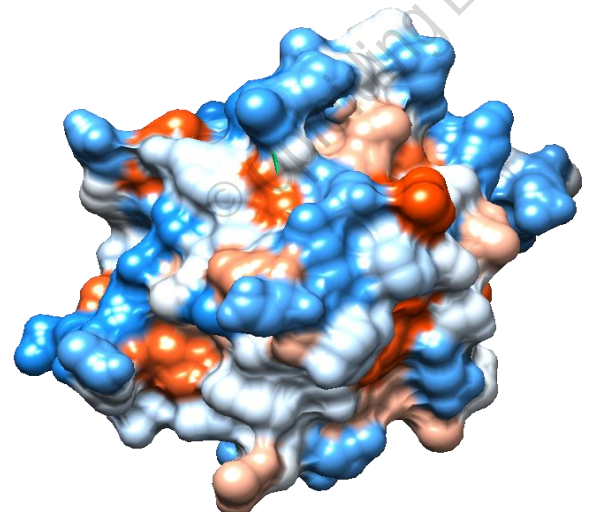
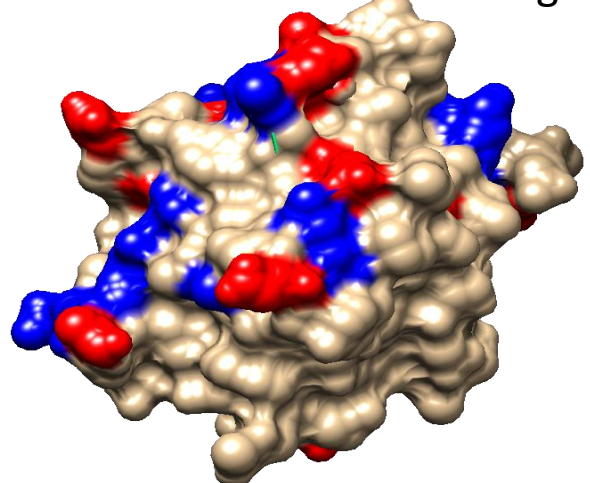
Hier zijn ook de zijketens van de aminozuren zie naar buiten uitsteken getoond



**Elk eiwit heeft een unieke TOPOGRAFIE van chemische groepen (zijketens van aminozuren) aan het oppervlak**

**→ Laat specifieke moleculaire herkenning met andere biomoleculen toe (zie laatste les)**

Hier is enkel de buitenkant getoond

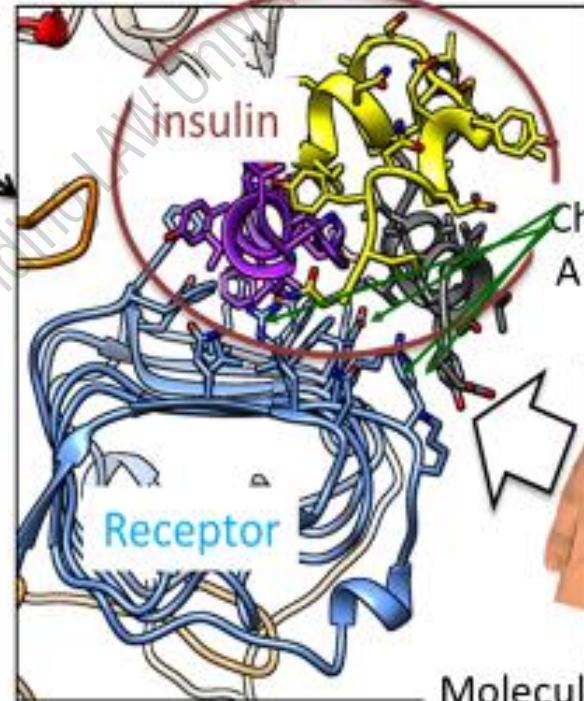
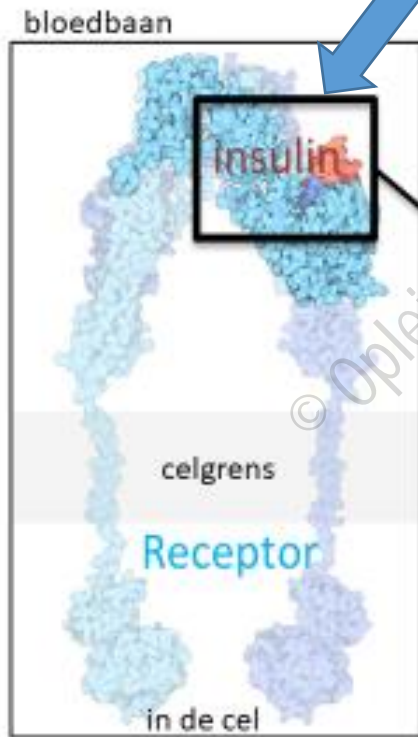
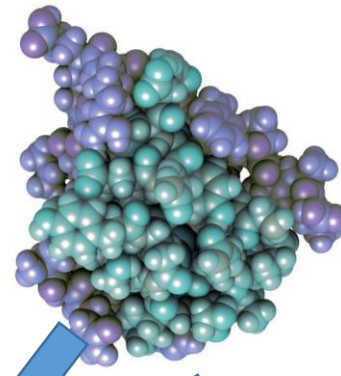
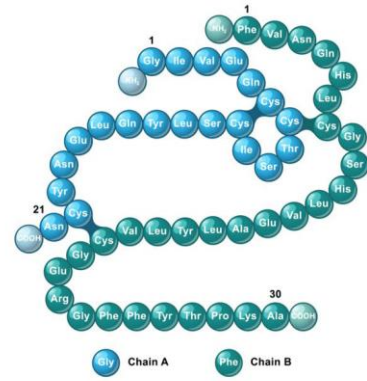


in donkerblauw positieve ladingen, rood negatieve ladingen, oranje apolaie groepen, lichtblaus apolaire groep





Insuline-eiwit  
Biopolymeer  
51 ami



Chemical fingers  
Aka functionele  
groepen



Moleculaire herkenning

## 4. lipidemoleculen: basis van vetreserve en celmembraan



**TRIACYLGLYCERIDEN**



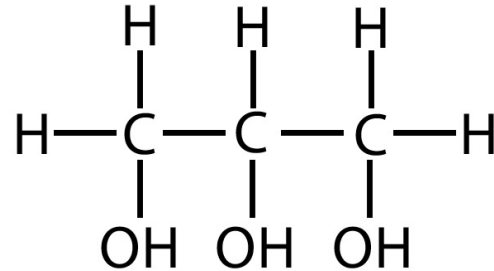
**FOSFOGLYCERIDEN**

© Opleiding LAW Universiteit Gent

# TRIACYLGLYCERIDEN (TAG) bouwstenen en vorming

## Bouwstenen

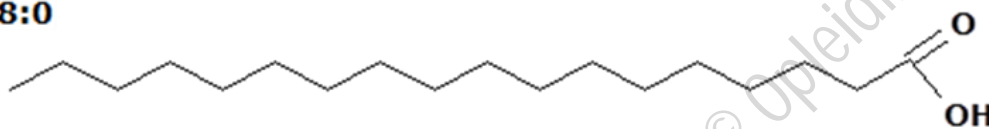
- Glycerol (deel II)



- Drie vetzuren = carbonzuur (deel II) met > 10 C-atomen

### Stearinezuur (verzadigd vetzuur)

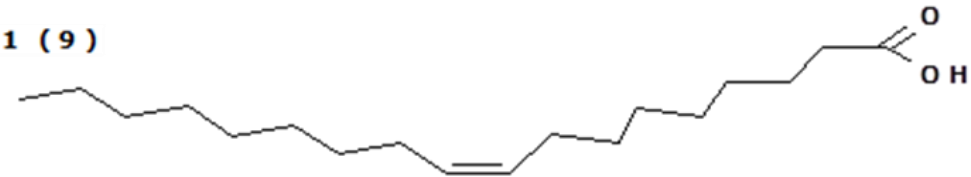
18:0



Alle C-atomen (behalve C1) in sp<sup>3</sup> hybridisatie:  
flexible molecule (rotatie rond elke C-C-as)

### Oleïnezuur (onverzadigd vetzuur)

18:1 (9)

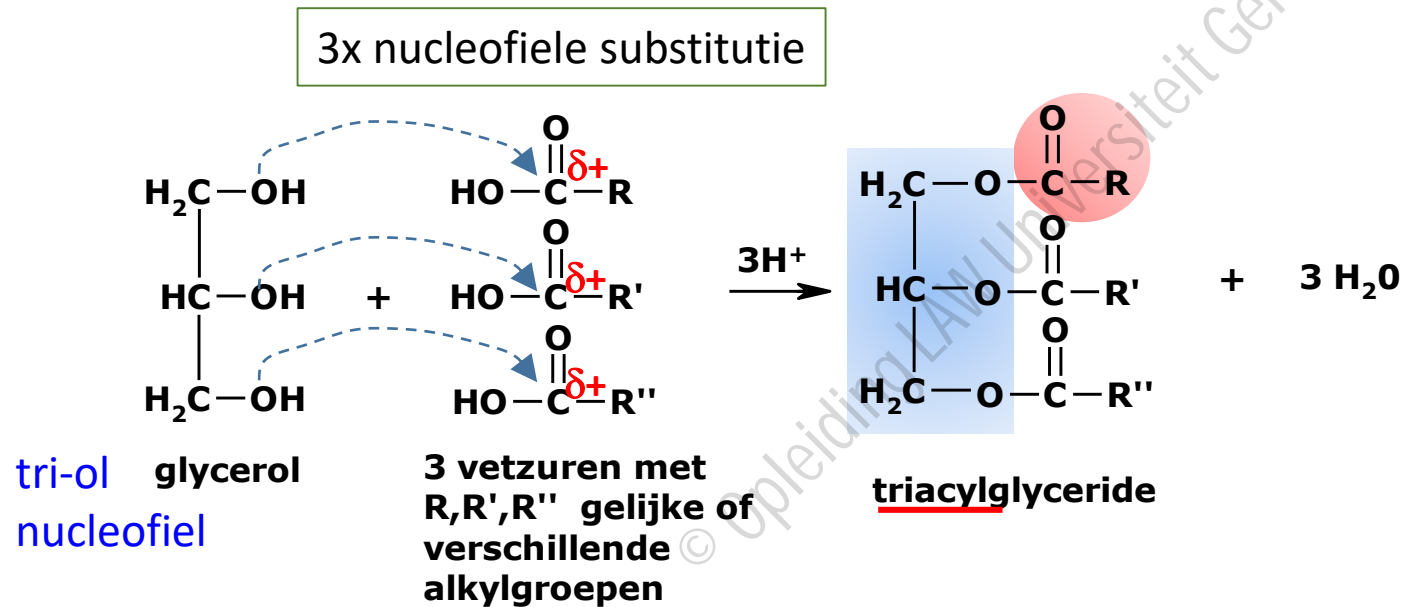


C 9 en C10 in sp<sup>2</sup> hybridisatie:  
Geen vrije rotatie rond C9-C10 as →  
Moleculen kunnen elkaar minder goed naderen

# TRIACYLGLYCERIDEN (TAG) bouwstenen en vorming

## Bouwstenen

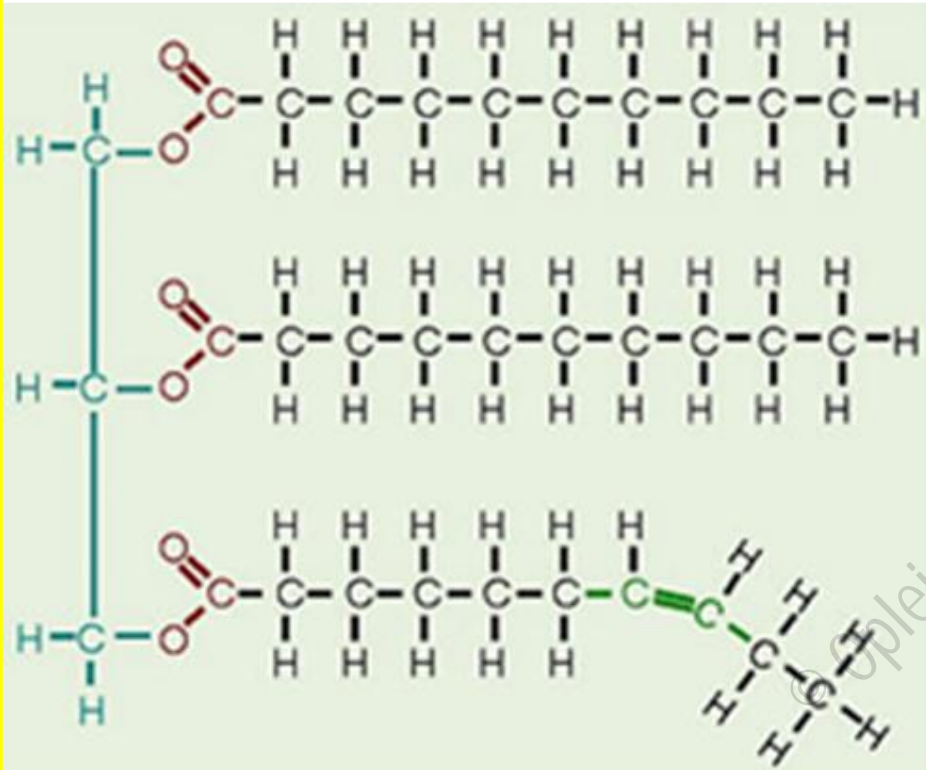
- Glycerol
- Drie vetzuren = carbonzuur (deel II) met > 10 C-atomen



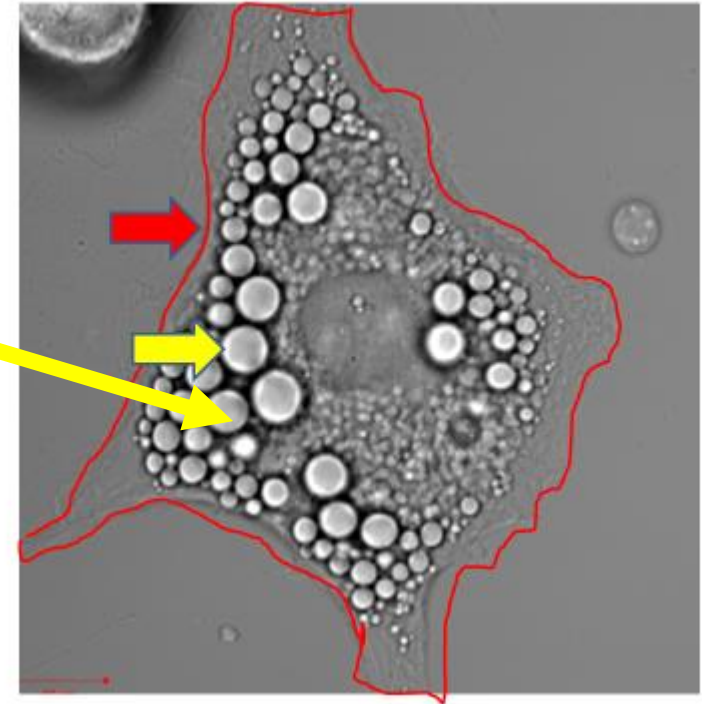
**3 MAAL EEN ESTERBINDING**



## VETmolecule in vetreserve



## Vetcel in ons lichaam



***APOLAIR (lange apolaire acylketens!)***

***Enkel londonkrachten***

***Slecht oplosbaar in water***

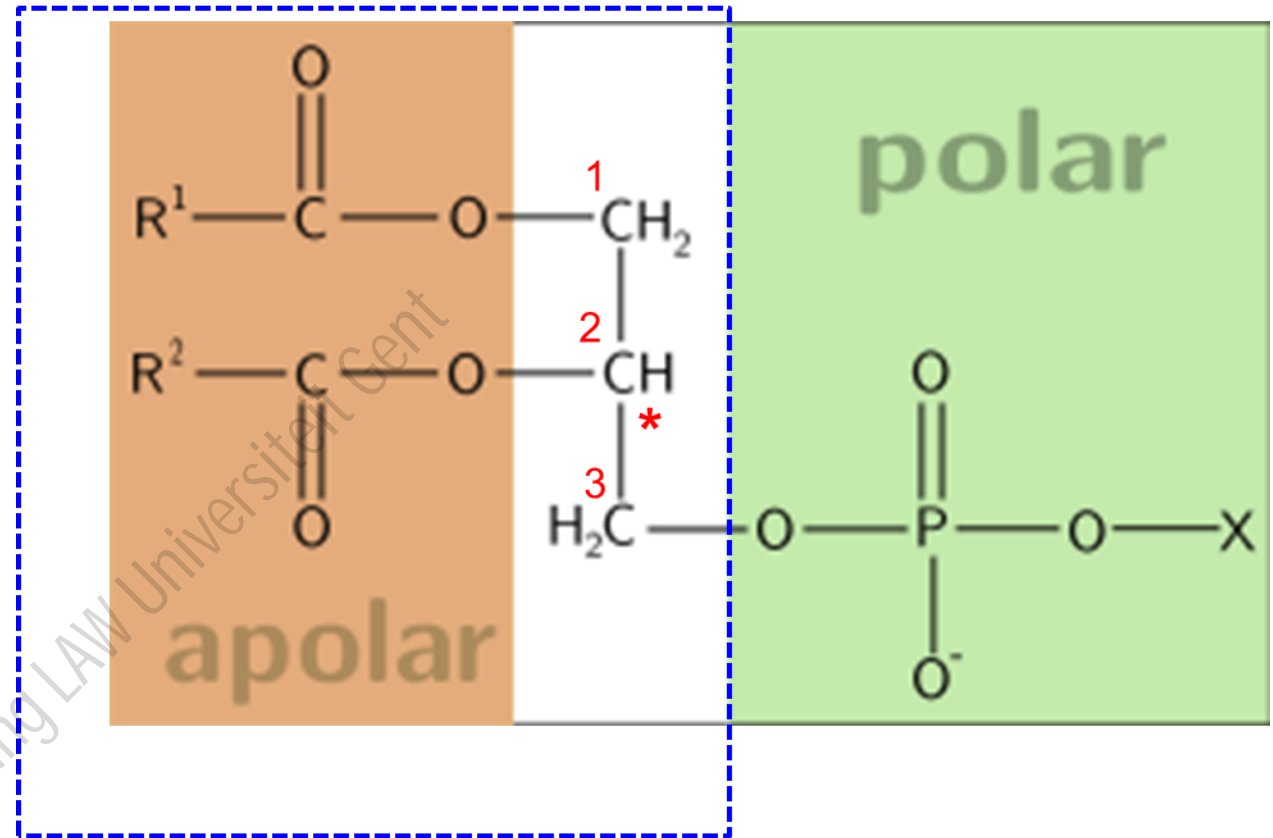
# FOSFOGLYCERIDEN

## bouwstenen en vorming

### Bouwstenen

- Glycerol
- TWEE vetzuren  
= carbonzuur (deel II) met > 10 C-atomen
- Eén polairegroep die fosfaatbevat

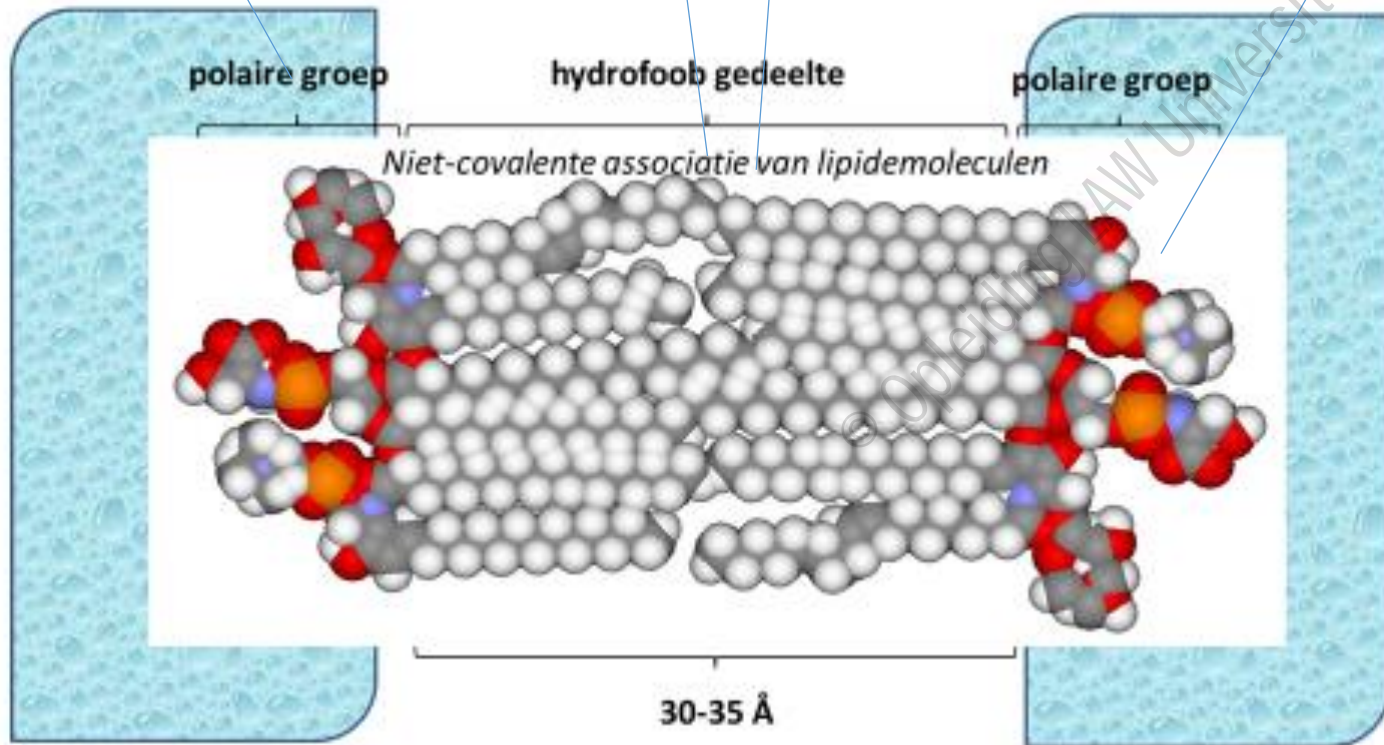
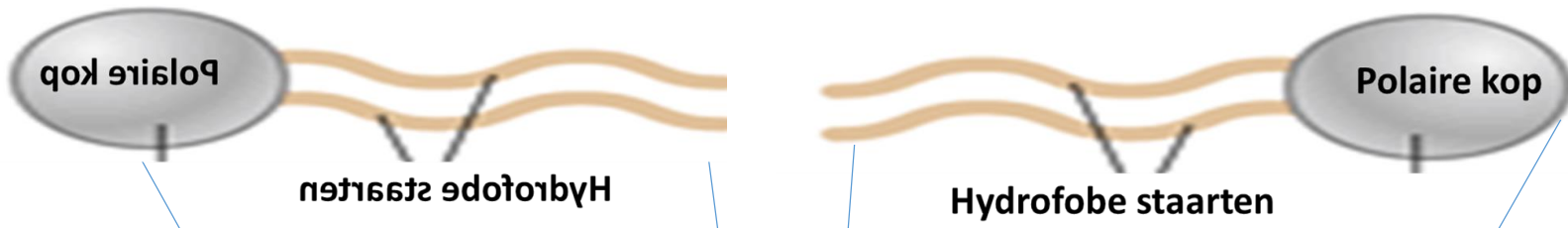
## Algemene structuur



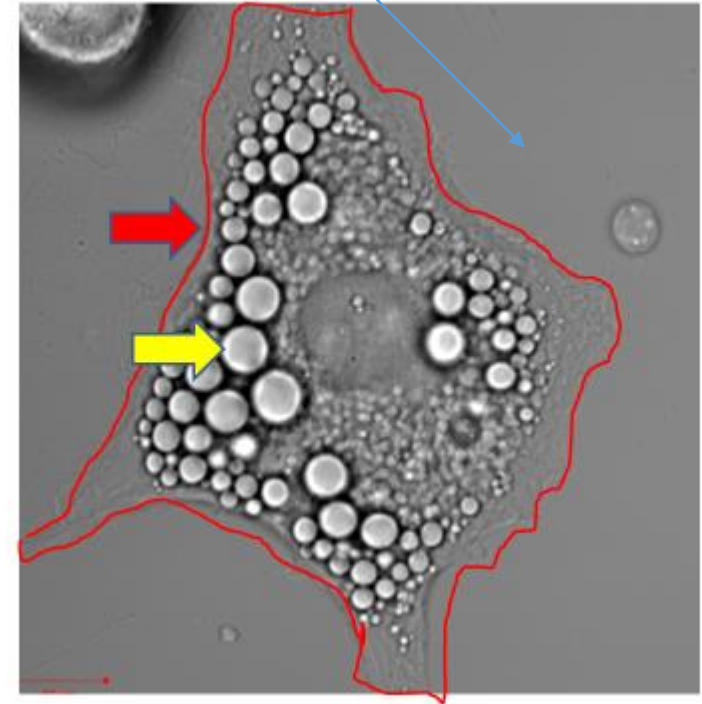
## ESTERS VAN VETZUREN

## Amfifatische of amfifiele moleculen





Vetcel in ons lichaam  
(celmembraan in rood)



**Basis van de celmembraan:  
begrenzing en barrièrefunctie**

# Deel III

## De chemische basis van leven

1. Suikers: bouwstenen van polysacchariden
2. Nucleotiden: bouwstenen van genetisch materiaal
3. Amino-zuren: bouwstenen van eiwitten
4. Lipidemoleculen: onderdeel van vetreserve en celmembraan

Structuren in dit deel III dien je niet te kunnen reproduceren; enkel te kunnen 'lezen' in functie van de kennis uit deel I en II

- Dragen ze polaire groepen?
- Zullen ze met watermoleculen kunnen associëren (via H-bruggen of andere zwakke krachten); zullen ze oplossen in water?
- Kunnen ze onderling IMK aangaan? Welke?
- Welke functionele groepen dragen ze?
- Volgens welke uit deel II gekende chemische eigen schappen binden bouwstenen op elkaar?