

Chemie

1ste Ba Fysica en Sterrenkunde

Verbindingen

3.1 MOLECULEN EN IONEN

- Atomen kunnen onderling combineren
 - contact via de e^- wolk
 - valentie-elektronen
- Krachten die atomen samenhouden:
“chemische binding”

- Meerdere soorten “*chemische bindingen*”

1) **Covalente** binding

niet-metaal...niet-metaal

2) **Ionaire** binding

metaal...niet-metaal

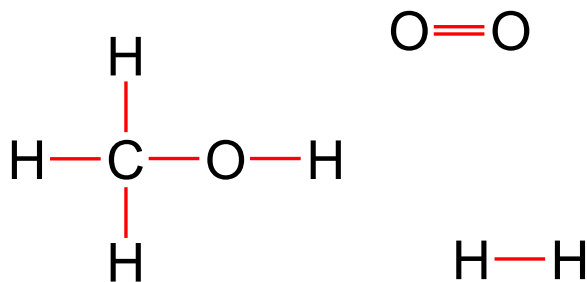
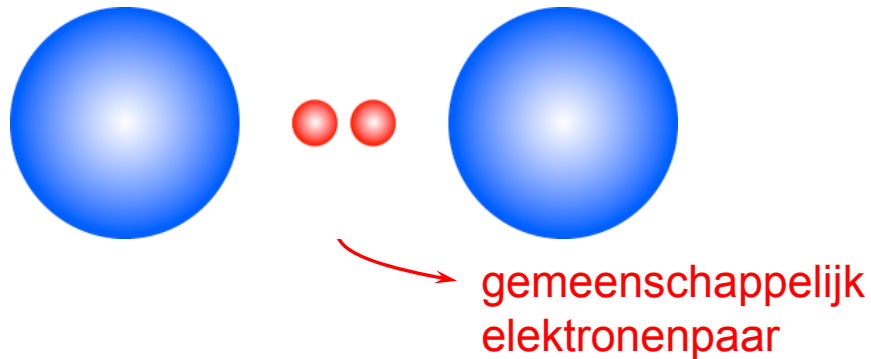
3) **Metaal**binding

metaal...metaal

4) ...

1) Covalente bindingen

→ tussen niet-metalen



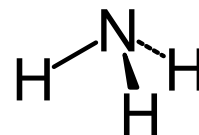
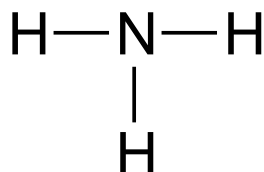
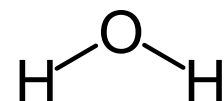
MOLECULE:
groep atomen die verbonden
zijn via covalente bindingen

Voorstelling:

- Chemische formule (molecuulformule):



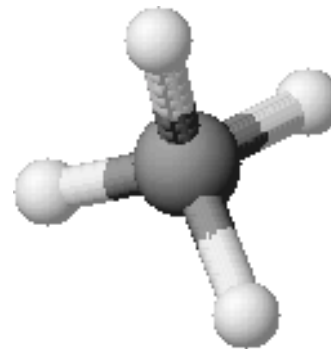
- Structuurformule:



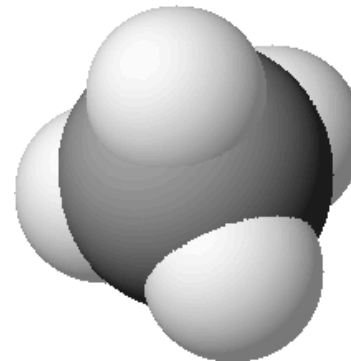
benadrukt de geometrie

- Molecuulmodellen

- ball and stick



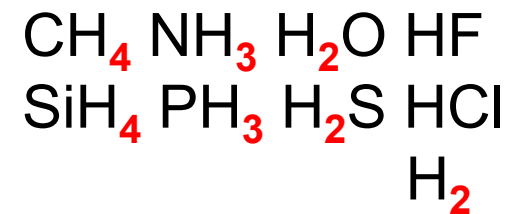
- spacefilling



Aantal H's dat covalent kan binden aan een niet-metaalatoom: → af te leiden uit periodiek systeem

← 4 3 2 1 0				
			H	He
C	N	O	F	Ne
Si	P	S	Cl	Ar
	As	Se	Br	Kr
			I	Xe
				Rn

edelgassen

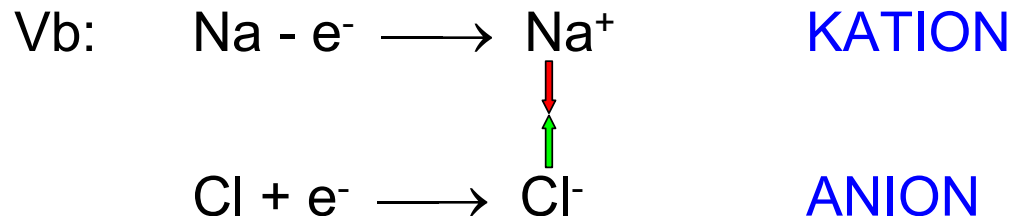


2) Ionaire bindingen

- tussen metaal en niet-metaal
- elektrostatische interactie tussen ionen

ION:

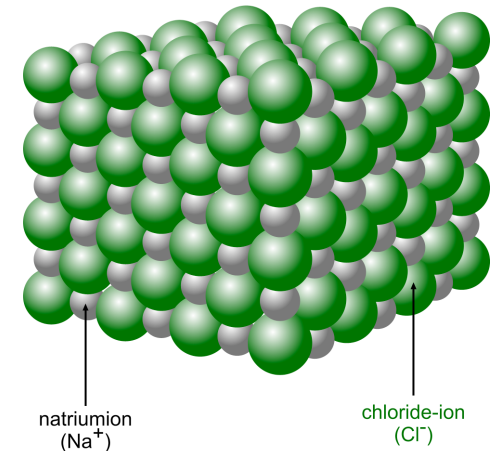
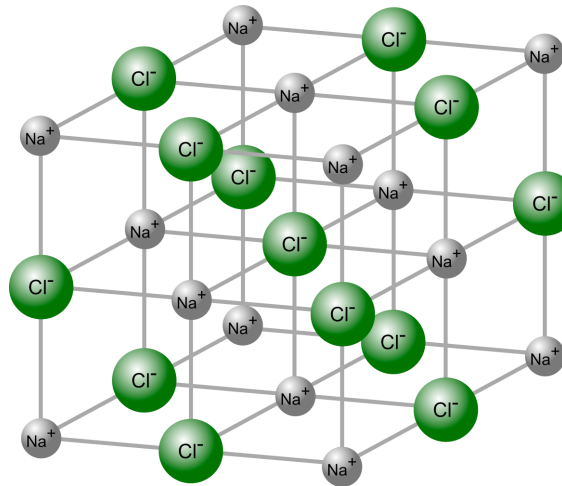
$\oplus$ of $\ominus$ elektrisch geladen
atoom of groep atomen



IONAIRE VERBINDING:
verzameling $\oplus$ en $\ominus$ ionen
in een 3-dimensionale
kristalstructuur

Vb: NaCl kristal

alternerende
 $\oplus$ en $\ominus$ ionen



																		NIET-METALEN:  anionen			
H 1																	METALEN:  kationen		He 2		
Li 3	Be 4													B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10		
Na 11	Mg 12													Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18		
K 19	Ca 20	Sc 21	Ti 22	V 23	Cr 24	Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28	Cu 29	Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36				
Rb 37	Sr 38	Y 39	Zr 40	Nb 41	Mo 42	Tc 43	Ru 44	Rh 45	Pd 46	Ag 47	Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54				
Cs 55	Ba 56	Lu 71	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77	Pt 78	Au 79	Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86				
Fr 87	Ra 88	Lr 103	Db 104	Jl 105	Rf 106	Bh 107	Hn 108	Mt 109													
La 57	Ce 58	Pr 59	Nd 60	Pm 61	Sm 62	Eu 63	Gd 64	Tb 65	Dy 66	Ho 67	Er 68	Tm 69	Yb 70								
Ac 89	Th 90	Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94	Am 95	Cm 96	Bk 97	Cf 98	Es 99	Fm 100	Md 101	No 102								

Vb. LiF , MgO , BaCl_2 , CaS , ... K_2O , Al_2O_3 , Ga_2S_3 , ...

edelgassen

				H^+		
		H^-	He	Li^+	Be^{2+}	
N^{3-}	O^{2-}	F^-	Ne	Na^+	Mg^{2+}	Al^{3+}
	S^{2-}	Cl^-	Ar	K^+	Ca^{2+}	Ga^{3+}
	Se^{2-}	Br^-	Kr	Rb^+	Sr^{2+}	In^{3+}
		I^-	Xe	Cs^+	Ba^{2+}	
			Rn			

K (19 p^+ , 19 e^-)

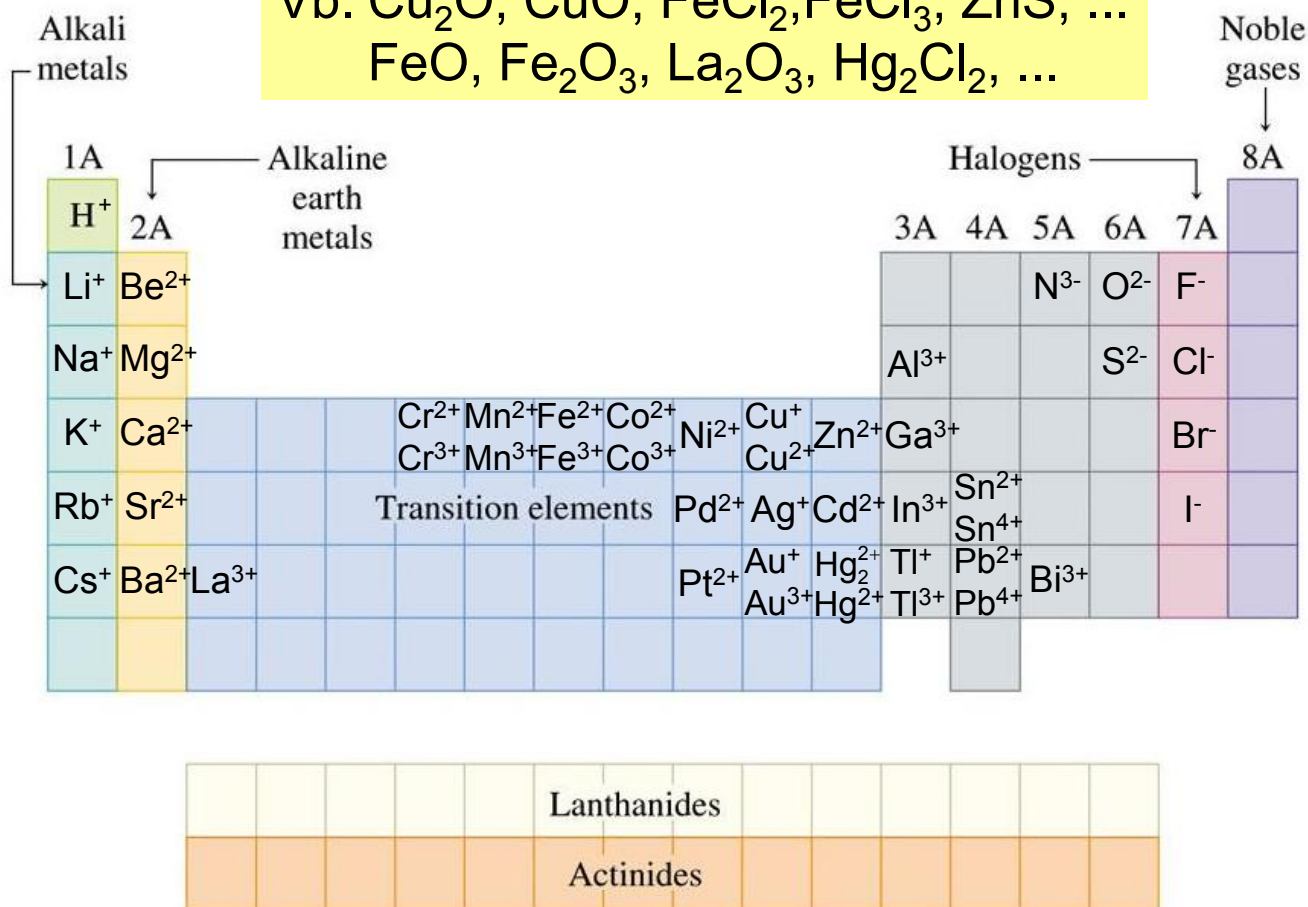
Meest nabije edelgas is Ar (18 p^+ , 18 e^-).

Dus K verliest 1 e^- en wordt K^+ (19 p^+ , 18 e^-).

O (8 p^+ , 8 e^-).

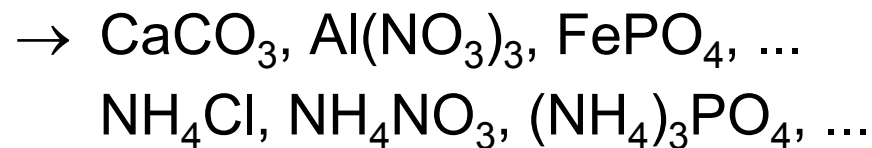
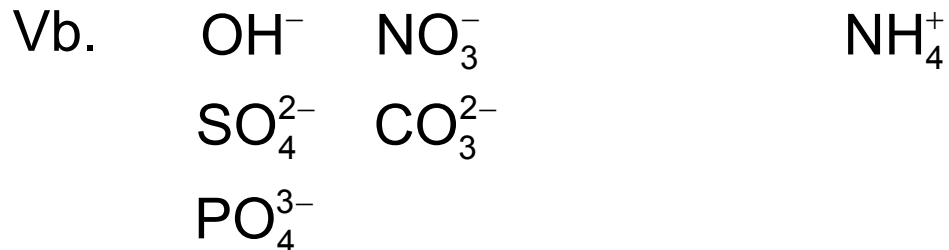
Meest nabije edelgas is Ne (10 p^+ , 10 e^-).

Dus O neemt 2 e^- op en wordt O^{2-} (8 p^+ , 10 e^-).



POLYATOMIGE IONEN

- 2 of meer atomen
- verbonden d.m.v. *covalente binding*
- lading voor het geheel

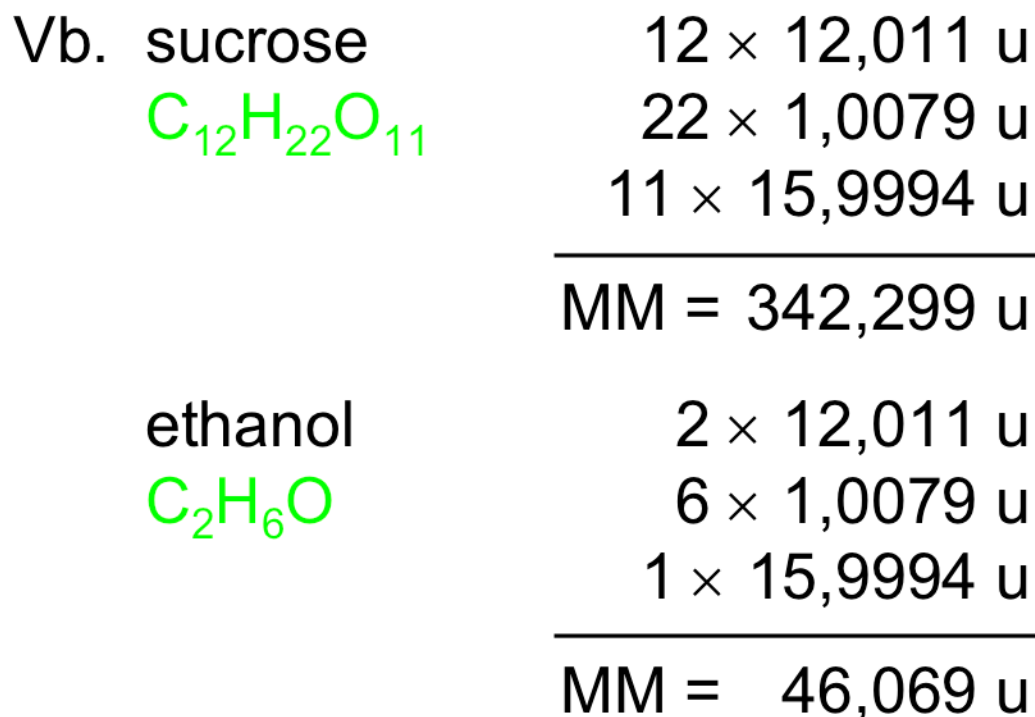


MOLECUULMASSA, FORMULEMASSA

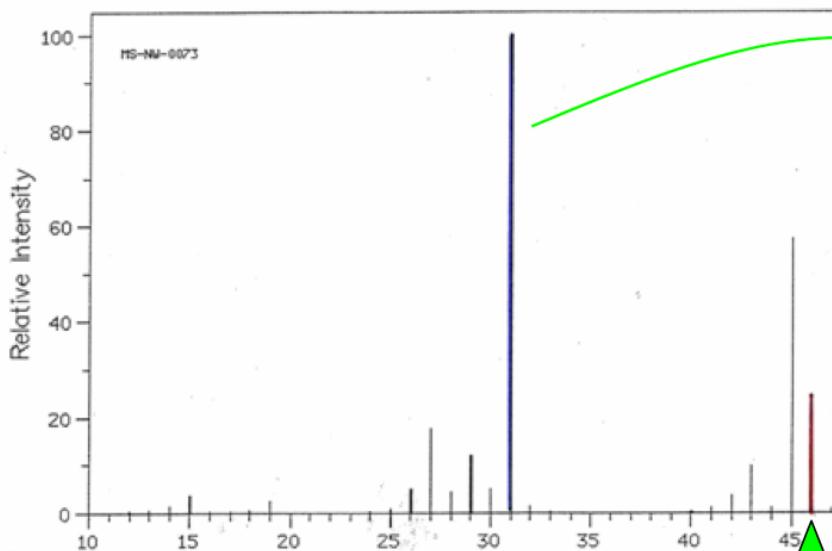
1) covalente verbindingen

$$MM = \Sigma(\text{AM's van de atomen in het molecuul})$$

		Relatieve AM/MM
Vb. water	$2 \times 1,0079 \text{ u}$	$A_r = 1,0079$
H_2O	$1 \times 15,9994 \text{ u}$	$A_r = 15,9994$
	$MM = 18,0152 \text{ u}$	$M_r = 18,0152$
chloroform	$1 \times 12,011 \text{ u}$	
CHCl_3	$1 \times 1,0079 \text{ u}$	
	$3 \times 35,453 \text{ u}$	
	$MM = 119,378 \text{ u}$	

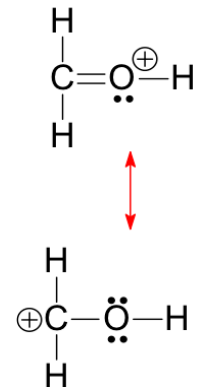


EXPERIMENTELE BEVESTIGING VIA *MASSASPECTROMETER*



ion met grootste
abundantie:

MM = 31 u

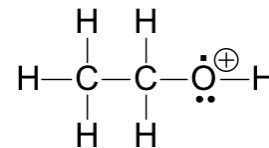


Ethanol $2 \times 12,011 \text{ u}$
 $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ $6 \times 1,0079 \text{ u}$
 $1 \times 15,9994 \text{ u}$

MM = 46,069 u

“moleculair ion”

exp:
46 u



2) ionaire verbindingen

→ geen bouweenheid!

→ ∞ herhaling van de formule-eenheid

FM = Σ (AM's van de samenstellende ionen
in de formule-eenheid)

Vb. Natriumchloride-kristal

$$\frac{\text{Na}^+}{\text{Cl}^-} = \frac{1}{1} \Rightarrow \text{formule-eenheid} = \text{NaCl}$$

$$\Rightarrow \text{FM (NaCl)} = \text{AM (Na)} + \text{AM (Cl)} = 58,44 \text{ u}$$

Vb. Calciumchloride-kristal

$$\frac{\text{Ca}^{2+}}{\text{Cl}^{-}} = \frac{1}{2} \Rightarrow \text{formule-eenheid} = \text{CaCl}_2$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \text{FM} (\text{CaCl}_2) &= \text{AM} (\text{Ca}) + 2 \times \text{AM} (\text{Cl}) \\ &= 110,98 \text{ u} \end{aligned}$$

Natriumfosfaat-kristal

$$\frac{\text{Na}^{+}}{\text{PO}_4^{3-}} = \frac{3}{1} \Rightarrow \text{formule-eenheid} = \text{Na}_3\text{PO}_4$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \text{FM} (\text{Na}_3\text{PO}_4) &= 3 \times \text{AM} (\text{Na}) + \text{AM} (\text{P}) \\ &\quad + 4 \times \text{AM} (\text{O}) \\ &= 163,94 \text{ u} \end{aligned}$$

3.4 DE MOL

Stof:	<i>atomair</i> → <i>macroscopisch</i>	
Cu	63,546 u	63,546 g
H ₂	2.0194 u	2.0194 g
NaCl	58,44 u	58,44 g
C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	352,299 u	352,299 g
	1 eenheid	? eenheden

N_A :
het aantal maal
dat 1u in 1g gaat

N_A
“getal van Avogadro”

32

1 mol is gelijk aan het aantal koolstofatomen in exact 12,0000 g zuiver ¹²C. Dit aantal is gelijk aan $6,022137 \cdot 10^{23}$ en wordt het getal van Avogadro genoemd (N_A).

Getal van Avogadro:

- Berekend (Perrin, Einstein, ...)
- Experimenteel: X-stralendiffractie, kristallografie, ...
- Definitie:

Hoeveelheid = aantal atomen in
EXACT 12 g $^{12}_6\text{C}$ nuclide

= $6,022 \cdot 10^{23}$ eenheden = **1 mol**

→ **Molaire massa:** massa van 1 mol eenheden

↪ $M_g; M_w; \mathcal{M}$ (g / mol)



Amadeo Avogadro
(1776 - 1856)

A_r ^{12}C nuclide = 12,000
 1 mol = # C-atomen in exact 12,000 g ^{12}C
 Of massa van 1 mol zuivere stof (g) = A_r of M_r
 Dit wordt de molaire massa M genoemd

Bestanddeel	A_r of M_r	Molaire massa M
^{12}C	$A_r = 12,000$	12,0000 g/mol
C	$A_r = 12,01$	12,01 g/mol
O ₂	$M_r = 32,00$	32,00 g/mol
NaCl	$M_r = 58,44$	58,44 g/mol

$$\text{stofhoeveelheid } n \text{ (mol)} = \frac{\text{massa } m \text{ (g)}}{\text{molaire massa } M \text{ (g/mol)}}$$

PROCENTUELE SAMENSTELLING

Zuivere verbinding: vaste chemische samenstelling

1) Chemische formule $\longrightarrow$ massa%
PRODUCT **ELEMENTEN**

Vb. NH_4NO_3 : $M_g = 80,043 \text{ g / mol}$

1 mol		80,043 g / mol		%
2 mol	N	28,013 g / mol	N	35,00
4 mol	H	4,032 g / mol	H	5,04
3 mol	O	47,998 g / mol	O	59,96

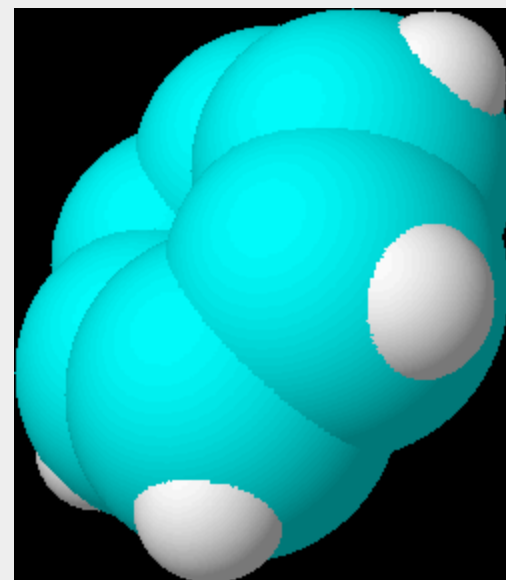
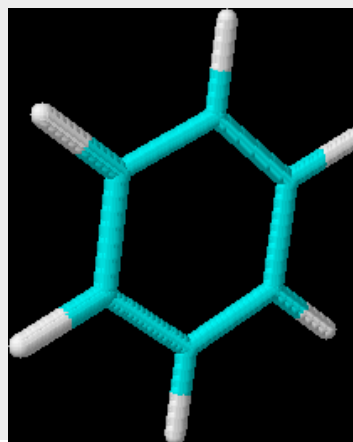
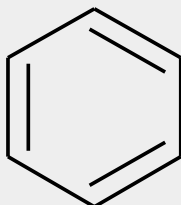
Brutoformule, minimale formule, structuurformule

Voorbeeld: benzeen

-minimale/empirische formule: CH

-brutoformule: C_6H_6

-structuurformule



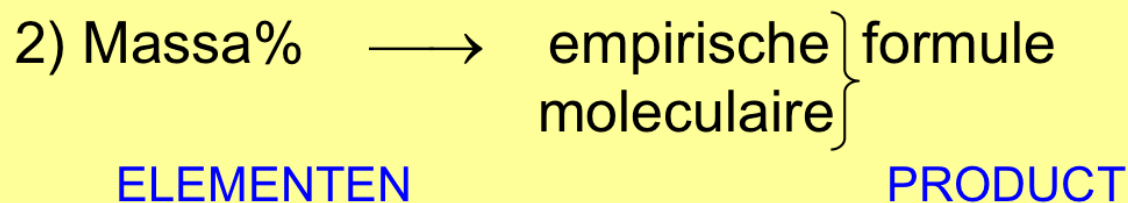
Minimale- en brutoformule vs structuur

Minimale- en brutoformules kunnen experimenteel bepaald worden (bomcalorimetrie en/of massaspectrometrie).

Voor de exacte structuur zijn echter spectroscopische technieken nodig die de functionele groepen bepalen.

Voorbeeld:

C_2H_6O : alcohol ? C_2H_5-OH
 ether ? CH_3-O-CH_3



Vb. Product **P** wordt verbrand tot CO_2 en H_2O
(C,H)

0,6509 g → 2,200 g + 0,450 g

Wat is het massapercentage C en H in **P**?
Wat is de empirische formule van **P**?

$$M_g (\text{CO}_2) = 44,01 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\Rightarrow 2,200 \text{ g CO}_2 \longrightarrow 0,050 \text{ mol CO}_2$$

$$0,050 \text{ mol C}$$

$$0,600 \text{ g C}$$

$$M_g (\text{H}_2\text{O}) = 18,015 \text{ g mol}^{-1}$$

$$\Rightarrow 0,450 \text{ g H}_2\text{O} \longrightarrow 0,025 \text{ mol H}_2\text{O}$$

$$0,050 \text{ mol H}$$

$$0,0504 \text{ g H}$$

Molverhouding $\frac{C}{H} =$ atoomverhouding $\frac{C}{H} = \frac{1}{1}$

$\Rightarrow$ Empirische formule = **CH**

$$\Rightarrow \% C = \frac{0,600}{0,6504} \times 100 = 92,2 \%$$

$$\Rightarrow \% H = \frac{0,0504}{0,6504} \times 100 = 7,8 \%$$

Empirische/minimale formule: **CH**

Brutoformule?: **C₂H₂, C₆H₆, ...?** (via MS!)

Oefening

Wat is de natuurlijke abundantie van ^{13}C , aannemende dat de geonormale atomaire massa van C uitsluitend wordt bepaald door ^{12}C en ^{13}C (verwaarloos de bijdrage van ^{14}C)

Antwoord: 1,1 %