

2. Atoombouw

1. Atoom

Sommige Griekse filosofen (Democritus – 400 v.C.) waren er al van overtuigd dat alle materie opgebouwd is uit massieve niet meer te delen bollen, de atomen.

Dalton (1808) kon op wetenschappelijke wijze het bestaan van atomen aantonen.

Volgens hem bestaat alle materie uit kleine compacte bollen.

De atomen van de verschillende elementensoorten onderscheiden zich van elkaar door een verschillende straal en massa.

Atomen van verschillende elementen kunnen zich in eenvoudige verhoudingen met elkaar binden tot bouwstenen van nieuwe stoffen.

2. Atoomkern (Rutherford)

Ten gevolge van proeven met kathodestraalbuizen worden achtereenvolgens de **elektronen** en de **protonen** ontdekt. (1870-1897)

Later werd ontdekt dat er in het atoom ook **neutronen** aanwezig zijn. (1932)

Rutherford (1911) beschiet een dun (0,0004 cm) goudblaadje met α -deeltjes. Op honderdduizend projectielen worden er slechts 1 tot 5 teruggekaatst. De rest vliegt er recht door of wordt afgebogen.

Dit alles leidt tot een nieuw model, waarbij men ervan uitgaat dat het atoom niet ondeelbaar (protonen, neutronen, elektronen) en niet compact is.

De **kern** (diameter slechts het 1/100 000 van die van het gehele atoom), bijna alle massa bevattend, bevindt zich in het centrum en bevat de massarijke protonen en neutronen.

De **elektronenmantel** is een grote ijle ruimte met daarin op alle mogelijke banen rond de kern bewegende elektronen.

3. Subatomaire deeltjes

Naam	Locatie	Symbool	Aantal	Relatieve massa	Relatieve lading
proton	kern	${}^1_1\text{p}$	Z	1,007 276	1+
neutron	kern	${}^1_0\text{n}$	$A - Z$	1,008 665	0
elektron	mantel	${}^0_{-1}\text{e}$	Z	0,000 549	1-

t.o.v. de atoommassa-
eenheid

$$= \frac{m(\text{kg})}{1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}$$

t.o.v. de elementaire
lading

$$= \frac{Q(\text{C})}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}}$$

Het **atoomnummer Z** (rangnummer, protonengetal, plaatsnummer) kan afgelezen worden in het periodiek systeem. Het atoomnummer Z geeft het aantal protonen in de kern weer en ook het aantal elektronen in de mantel.

Merk op dat het aantal (negatieve) elektronen in de elektronenwolk gelijk is aan het aantal (positieve) protonen in de kern: atomen hebben namelijk geen lading, het zijn neutrale deeltjes.

De kerndeeltjes (protonen en neutronen) noemt men ook **nucleonen**.

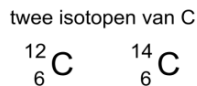
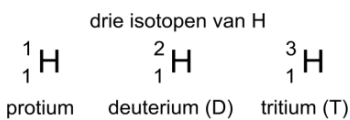
Het **nucleonengetal A** geeft het aantal nucleonen (protonen + neutronen) weer. Het wordt ook **massagetal** genoemd. Het verschil $A - Z$ geeft het aantal neutronen in de kern.

Dit massagetal vinden we niet terug in het PS. Het is verschillend voor de verschillende isotope nucliden van het element.

Een nuclide van een bepaald element E wordt als volgt voorgesteld: ${}^A_Z E$

4. Isotope nucliden

Nucliden zijn atoomsoorten met een welbepaald aantal protonen en neutronen. Gaat het om nucliden van eenzelfde elementensoort dan kan men de term **isotopen** gebruiken. Isotopen zijn dus atomen met dezelfde plaats in het PS of atomen met eenzelfde Z en een verschillende A.



Vermits het de elektronenmantel is die de chemische eigenschappen van de atomen bepaalt, vertonen alle isotopen van een zelfde elementensoort een zelfde chemisch gedrag.

De atoommassa's van de elementen kunnen we terugvinden in het PS. Die atoommassa is het gemiddelde van de atoommassa's van de verschillende isotope nucliden van dat element rekening gehouden met de frequentie waarmee ze voorkomen. Van het element chloor komen in de natuur volgende isotopen voor:

Isotope nuclide	% voorkomen
${}^{35}_{17}\text{Cl}$	75,76 %
${}^{37}_{17}\text{Cl}$	24,24 %

Dat leidt tot de volgende relatieve atoommassa voor het element chloor:

$$A_r(\text{Cl}) = \frac{34,97 \times 75,76 + 36,97 \times 24,24}{100} = 35,45$$

5. Atoommodel van Bohr

De structuur van de elektronenmantel bepaalt de chemische eigenschappen van het atoom.

Men onderscheidt in het Bohr-model 7 schillen of hoofdenergieniveaus. Ze krijgen een letter en een schilnummer en vanaf de kern naar buiten geeft dat:

Schil	K	L	M	N	O	P	Q
Nummer (n)	1	2	3	4	5	6	7

Het maximaal aantal elektronen dat per schil kan aanwezig zijn bedraagt $2n^2$.

Dat betekent concreet het volgende:

op de eerste schil ($n=1$)	maximum	$2 \times 1^2 = 2$ elektronen
op de tweede schil ($n=2$)	maximum	$2 \times 2^2 = 8$ elektronen
op de derde schil ($n=3$)	maximum	$2 \times 3^2 = 18$ elektronen
op de vierde schil ($n=4$)	maximum	$2 \times 4^2 = 32$ elektronen

Op de volgende schillen komen er niet meer dan 32 elektronen voor.

Bij de verdeling van de elektronen over de schillen (**elektronenconfiguratie**) moet men de volgende regels in acht nemen.

De elektronen zitten liefst zo dicht mogelijk tegen de kern (laagste energie-inhoud voor het atoom). De schillen worden dus opgevuld van binnen naar buiten.

Op de buitenste schil mogen nooit meer dan acht elektronen en op de voorlaatste schil nooit meer dan achttien elektronen voorkomen. De opvulling tot het maximum gebeurt dan later. (Aufbauschema: zie elektronenconfiguratie)

De elektronenconfiguratie kan ook uit het periodiek systeem worden afgelezen.

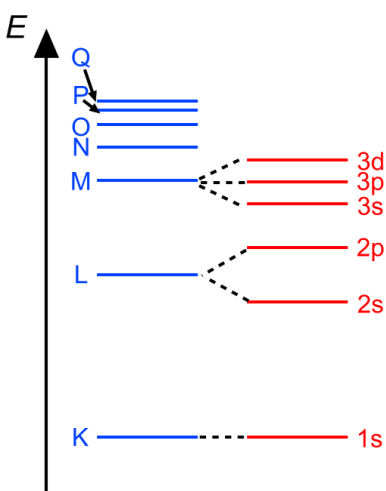
Vaak volstaat de voorstelling waarbij enkel de elektronen van de buitenste schil worden weergegeven.

Op basis van deze regels kunnen we voor de eerste twintig elementen de elektronenconfiguratie schrijven zoals weergegeven in de onderstaande tabel.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	
	H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar	K	Ca	
K	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	
L			1	2	3	4	5	6	7	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	
M											1	2	3	4	5	6	7	8	8	8	
N																				1	2

6. Kwantummechanisch atoommodel

Volgens het atoommodel van Bohr bewegen de elektronen met grote snelheden rond de kern. Bovendien hebben die elektronen bepaalde energieën. Met andere woorden, zij zijn verdeeld over een aantal schillen of hoofdenenergieniveaus volgens welbepaalde regels.



Er zijn 7 hoofdenenergieniveaus of schillen (K, L, M, ..., Q) die genummerd worden van 1 tot 7. Dit nummer wordt het **hoofdkwantumgetal** n genoemd.

Hoofdkwantumgetal n
 $n = 1, 2, 3, \dots, 7$

Het hoofdkwantumgetal n zegt iets over de afstand tussen de kern en het elektron.

Deze hoofdniveaus, uitgezonderd het eerste, bevatten een aantal subniveaus waarvan de energieën lichtjes verschillen.

Het nummer van het subniveau wordt het **nevenkwantumgetal** l genoemd en dat kan alle gehele waarden tussen 0 en $(n-1)$ hebben.

Nevenkwantumgetal l

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$$

In onderstaand schema vind je een overzicht van de verschillende hoofd- en subniveaus.

Hoofdniveau		Aantal subniveaus	Naam	Nevenkwantumgetal l
1	K	1	1s	0
2	L	2	2s	0
			2p	1
3	M	3	3s	0
			3p	1
			3d	2
4	N	4	4s	0
			4p	1
			4d	2
			4f	3
5	O	5	5s	0
			5p	1
			5d	2
			5f	3
6	P	6	6s	0
			6p	1
			6d	2
			6f	3
7	Q	7	7s	0
			7p	1
			7d	2
			7f	3

Uit spectroscopisch onderzoek blijkt verder dat in elk subniveau de elektronen een bepaald aantal banen ter beschikking hebben. Dit aantal hangt af van het nevenkwantumgetal van het subniveau en de banen worden genummerd van $-l$ tot $+l$. Dit nummer noemt men het **magnetisch kwantumgetal** m_l .

Magnetisch kwantumgetal m_l

$$m_l = -l, \dots, 0, \dots, +l$$

Subniveau	Aantal banen	m_l
s	1	0
p	3	-1, 0, +1
d	5	-2, -1, 0; +1, +2
f	7	-3, -2, -1, 0; +1, +2, +3

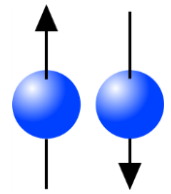
Uit de doubletstructuur van de spectraallijnen leidt men af dat in elke baan maximaal twee elektronen kunnen bewegen. Die twee elektronen voeren een tegengestelde spinbeweging uit en krijgen een nummer ($+\frac{1}{2}$ of $-\frac{1}{2}$) dat men het **spinkwantumgetal** m_s noemt.

Spinkwantumgetal m_s

$$m_s = +\frac{1}{2} \text{ of } -\frac{1}{2}$$

Door die tollende bewegingen rond hun eigen as ontstaan namelijk zeer zwakke magneetveldjes die tegengesteld gericht zijn.

De pijltjes geven aan hoe een kurkentrekker zich verplaatst als de handgreep draait in dezelfde zin als het elektron. Tegengestelde pijltjes (tegengestelde magneetveldjes) trekken elkaar aan en daardoor stoten die elektronen (met tegengestelde spin) elkaar minder af.



Die pijltjes worden later ook gebruikt om elektronen voor te stellen.

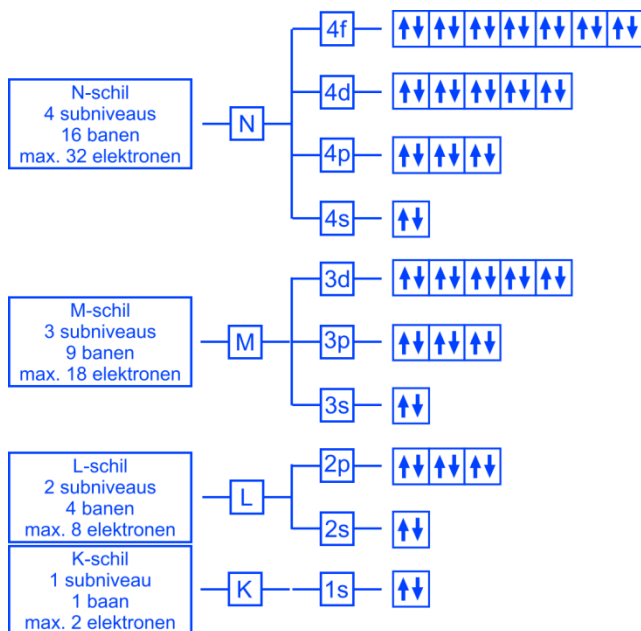
Samengevat

De elektronen zijn verdeeld over een aantal hoofdenergieniveaus die in energie verschillen (schillen): K, L, M, N, ...

In elk hoofdenergieniveau zijn er een aantal subniveaus die in energie verschillen: s, p, d, f.

In elk subniveau zijn er een aantal banen.

In elke baan kunnen maximaal twee elektronen.



7. Elektronenconfiguraties

De elektronen zijn volgens een bepaald stramen verdeeld over de verschillende hoofd- en subniveaus en banen. Hierbij moet slechts één regel in acht genomen worden: **regel van de minimale energie**.

Dit betekent:

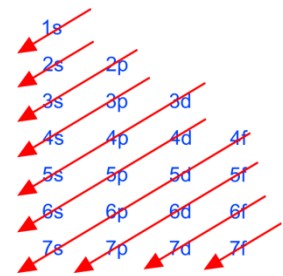
Er zijn geen elektronen aanwezig in een bepaald subniveau als niet alle energetisch lagere subniveaus opgevuld zijn.

In een bepaald subniveau wordt eerst één elektron in elke baan geplaatst (de verschillende banen hebben immers dezelfde energie) **alvorens elektronenparen te vormen** (twee elektronen in dezelfde baan plaatsen vergt energie): regel van de **maximale multiplicititeit**. (Regel van Hund)

De twee elektronen in een zelfde baan hebben een tegengestelde spin. (Pauli-verbod: In een zelfde atoom komen geen twee elektronen voor met vier gelijke kwantumgetallen. Dat heeft voor gevolg dat in een orbitaal maximaal twee elektronen met tegengestelde spin kunnen voorkomen.)

Dit levert volgende elektronenconfiguraties op:

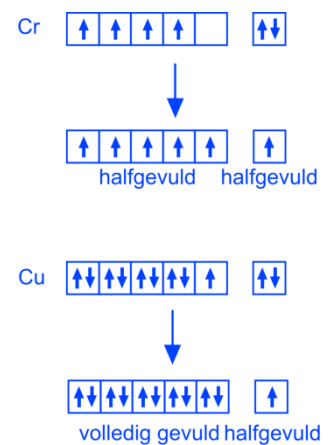
${}^1_1\text{H}$	$1s^1$	$1s^1$
${}^2_2\text{He}$	$1s^2$	$1s^2$
${}^3_3\text{Li}$	$1s^2 2s^1$	$[\text{He}] 2s^1$
${}^4_4\text{Be}$	$1s^2 2s^2$	$[\text{He}] 2s^2$
${}^5_5\text{B}$	$1s^2 2s^2 2p^1$	$[\text{He}] 2s^2 2p^1$
${}^6_6\text{C}$	$1s^2 2s^2 2p^2$	$[\text{He}] 2s^2 2p^2$
${}^7_7\text{N}$	$1s^2 2s^2 2p^3$	$[\text{He}] 2s^2 2p^3$
${}^8_8\text{O}$	$1s^2 2s^2 2p^4$	$[\text{He}] 2s^2 2p^4$
${}^9_9\text{F}$	$1s^2 2s^2 2p^5$	$[\text{He}] 2s^2 2p^5$
${}^{10}_{10}\text{Ne}$	$1s^2 2s^2 2p^6$	$[\text{He}] 2s^2 2p^6$
${}^{11}_{11}\text{Na}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	$[\text{Ne}] 3s^1$
${}^{12}_{12}\text{Mg}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	$[\text{Ne}] 3s^2$
${}^{13}_{13}\text{Al}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$
${}^{14}_{14}\text{Si}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^2$
${}^{15}_{15}\text{P}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^3$
${}^{16}_{16}\text{S}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^4$
${}^{17}_{17}\text{Cl}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^5$
${}^{18}_{18}\text{Ar}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	$[\text{Ne}] 3s^2 3p^6$
${}^{19}_{19}\text{K}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$	$[\text{Ar}] 4s^1$
${}^{20}_{20}\text{Ca}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$	$[\text{Ar}] 4s^2$
${}^{21}_{21}\text{Sc}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$	$[\text{Ar}] 3d^1 4s^2$



Energievolgorde van de subniveaus

Enkele elementen hebben een afwijkende configuratie, o.a.:

${}^{24}_{24}\text{Cr}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$	i.p.v.	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4 4s^2$
${}^{29}_{29}\text{Cu}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$	i.p.v.	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9 4s^2$



Volledig en halfgevulde subniveaus zijn stabiel

Deze afwijkende configuratie wordt verklaard door aan te nemen dat halfgevulde en volledig gevulde subniveau extra stabiel zijn.

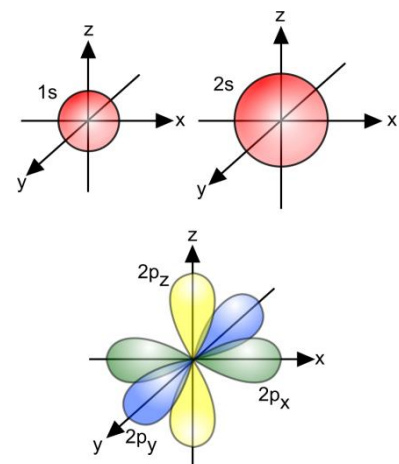
Het zijn de elektronen, of beter, de elektronenverdelingen van de buitenste schil die de chemische eigenschappen van een atoom bepalen.

Onder buitenste schil verstaan we de verzameling van subniveaus met hoogste hoofdkwantumgetal.

De aantrefkans van de elektronen rond de kern kunnen we met een bepaalde vorm voorstellen. Deze vormen verschillen in afmetingen naargelang de waarde van n .

s-orbitalen hebben een bolvorm, p-orbitalen hebben de vorm van een halter of zandloper.

Hoe groter het hoofdkwantumgetal n , hoe uitgestrekter de orbitale.



s- en p- orbitalen

Op die manier krijgen de atomen een ruimtevormelijk karakter en krijgen we meer inzicht omtrent de ruimtelijke structuren van atomen en moleculen.

Voorbeeld

