

## Inhoud

1.	Inleiding .....	2
2.	Het spectrum van waterstof en het atoommodel van Bohr .....	6
3.	Het atoommodel van Bohr-Sommerfeld .....	9
4.	Elektronenconfiguratie .....	12
5.	Het periodiek systeem .....	13
5.1.	Historiek .....	13
5.2.	Huidige opbouw van het periodieke systeem .....	14
5.3.	Gebruik .....	17
6.	Materie en energie .....	19
7.	Het onzekerheidsprincipe van Heisenberg .....	20
8.	Het golfmechanisch model van een atoom (zie ook .....	21
9.	Vergelijkingen van Schrödingen .....	22

	<b>LEERPLANDOELSTELLINGEN – leerplan 2014-008</b>		<b>LEERINHOUDEN</b>
	<b>De leerlingen kunnen</b>		
SET 12	1	een overzicht van de energieniveaus in een atoom geven en uitleggen dat de energie van elektronen in een atoom gekwantiseerd is.	Ergieniveaus, kwantumgetallen Grondtoestand en aangeslagen toestand Hoofd-energieniveau, het subniveau, het magnetisch deelniveau, de spin van een elektron, de kwantumgetallen $n$ , $l$ , $m_l$ en $m_s$
SET 2	2	de betekenis van de kwantumgetallen koppelen aan orbitalen.	s-, p-, d- en f-orbitalen Aantrefkans van een elektron Maximale bezetting van s-, p-, d- en f-orbitalen Grootte, vorm en oriëntatie van s- en p- orbitalen
SET	3	elektronenconfiguraties van elementen uit de a-groepen en de b-groepen schrijven.	Regel van de minimale energie Regel van Hund Verbodswet van Pauli Elektronenconfiguratie met pijltjes en / of elektronenconfiguratie gebruik makend van s,p, d, f Verkorte notatie (op basis van edelgassen) De opvullingsvolgorde van orbitalen Inversie
SET 5	4	het verband tussen deze elektronenconfiguraties en de opbouw van het periodiek systeem beschrijven.	s-blok, p-blok, d-blok en f-blok

# H o f d s t u k 1 : A t o m b o u w

## 1. Inleiding

Chemische verschijnselen zijn een eeuwenoud gekend fenomeen. Verwerking van ertsen om metalen te produceren (productie wapens en sierraden) en gebruik van balsems zijn slechts twee voorbeelden van chemische verschijnselen die hun toepassing kenden voorheen 1000 BC.

De Grieken poogden als eersten de chemische veranderingen te verklaren. [Empedokles](#) (492-432 BC) onderstelde dat alles was opgebouwd uit een combinatie van vier elementen, namelijk vuur, water, aarde en licht. De Grieken dachten ook na of materie bestond uit kleine, ondeelbare deeltjes dan wel oneindig deelbaar in kleinere delen is. [Leucippus](#) (470-410 BC) en zijn leerling [Democritus](#) (460-370 BC) gingen er van uit dat materie opgebouwd is uit kleine, ondeelbare deeltjes: atomen – elk met een eigen gewicht, grootte en vorm. Deze theorie is waarschijnlijk bedacht door Leucippus maar het was **Democritus** die er orde in schiep en ze bekendheid gaf. Deze theorie is volledig voortgekomen uit filosofische overwegingen, niet uit experimentele gegevens. [Plato](#) (427-347 v. Chr) kantte zich tegen deze atoomtheorie en stelde dat alles was opgebouwd uit water, aarde, lucht en vuur. Deze vier elementen waren zelf opgebouwd uit kleinere eenheden, namelijk veelvlakken waarvan de zijvlakken gelijkzijdige driehoeken waren. Ook volgens [Aristoteles](#) (364-322 v. Chr.) was alles opgebouwd uit diezelfde 4 elementen. De invloed van Aristoteles was zeer groot en reikte tot het einde van de 18<sup>de</sup> eeuw.

Tot in de 18<sup>de</sup>-19<sup>de</sup> eeuw werd de chemie vooral gedomineerd door 'alchemie', waarin 'geleerden' zich vooral bezig hielden met het zoeken naar een methode om goedkope metalen als lood om te vormen tot goud.

De Ier [Robert Boyle](#) (1627-1697) was de eerste chemicus die echte kwantitatieve experimenten uitvoerde. Hij legde de relatie tussen druk en volume van gassen vast ( $pV=nRT$ ).

De Fransman [Antoine Lavoisier](#) (1743-1794) voerde heel wat nauwgezette experimenten (wegen van uitgangsstoffen en reactieproducten) uit en toonde aan dat massa niet geschapen of vernietigd wordt (wet van behoud van massa). Lavoisier kon ook aantonen dat het element zuurstof betrokken is bij verbranding. Als belastinginner werd hij als een vijand van het volk aanzien, waardoor hij op de guillotine in 1794 tijdens de Franse Revolutie om het leven kwam.

De Franse [Joseph Proust](#) (1754-1826) kon aantonen dat een gegeven verbinding altijd dezelfde massaverhouding aan elementen bevat (vb. in kopercarbonaat zijn 5,3 delen koper voor 4 delen zuurstof en 1 deel koolstof aanwezig): dit is de wet van de constante massaverhouding.

De bevindingen van Proust deden [John Dalton](#) (1766-1844) nadenken over atomen: als een element bestond uit kleine individuele partikels, dan bestond een stof altijd uit dezelfde combinatie van deze atomen. Dit kon verklaren hoe de relatieve massa van alle elementen dezelfde was in een gegeven verbinding. Dalton ontdekte dat sommige elementen meer dan één verbinding konden vormen, elk met een verschillende (maar constante) relatieve massaverhouding van elementen: vb. 1.33g O en 2.66g O ten opzichte van 1g C. Dit kon eenvoudig worden verklaard door aan te nemen dat de tweede stof tweemaal zoveel O bevatte dan de eerste stof (law of multiple proportions).

In 1808 publiceerde [John Dalton](#) zijn atoomtheorie, die volgende elementen omvatte:

- elementen bestaan uit kleine partikels: atomen;
- alle atomen van eenzelfde element zijn gelijkaardig, atomen van verschillende elementen verschillen van elkaar;
- een chemische stof bestaat uit een combinatie van atomen, een gegeven chemische stof bestaat steeds uit eenzelfde aantal en soort atomen;
- bij een chemische reactie wijzigen atomen niet, maar verbinden ze zich op een andere manier (herschikking).

In 1809 voerde [Joseph Louis Gay-Lussac](#) (1778-1850) een reeks experimenten uit met gassen (2 volumes waterstofgas reageerden met 1 volume zuurstofgas tot 2 volumes gasvormig water; 1 volume waterstofgas reageerde met 1 volume chloorgas tot 2 volumes gasvormig zoutzuur; enzovoort). In 1811 interpreteerde [Amedeo Avogadro](#) (1776-1856) deze resultaten door voor te stellen dat bij dezelfde temperatuur en druk, verschillende gassen steeds een gelijke hoeveelheid deeltjes bevatten (wat impliceert dat de afstand tussen de deeltjes bijzonder groot is in vergelijking tot de grootte van de deeltjes zelf). Twee moleculen waterstofgas reageren zo met een molecule zuurstofgas tot twee moleculen water. Deze waarnemingen konden begrepen worden door te veronderstellen dat de moleculen van de gebruikte gassen di-atomisch waren:  $H_2$ ,  $Cl_2$ ,  $O_2$ , etc... De interpretatie van Avogadro werd echter door de meeste chemici niet geloofwaardig geacht (omdat men veronderstelde dat atomen van eenzelfde element zich niet met elkaar binden).

Omwille van het ontbreken van eensgezindheid over de formule van heel wat stoffen, konden atoommassa's ook niet correct worden bepaald. [Stanislao Cannizzaro](#) (1826-1910) bracht hier verandering in. Hij ging er van uit dat stoffen uit gehele aantallen atomen bestonden (cf. Dalton) en dat de hypothese van Avogadro correct was. Door de relatieve massa van gelijke volumes van gassen te bepalen, kon hij de atoommassa van heel wat elementen bepalen. Zo bepaalde hij dat de

- verhouding massa 1 L zuurstofgas / 1 L waterstofgas =  $16 / 1 = 32 / 2$

\*

- verhouding massa 1 L koolstofdioxide / 1 L waterstofgas =  $22 / 1 = 44 / 2$  \*

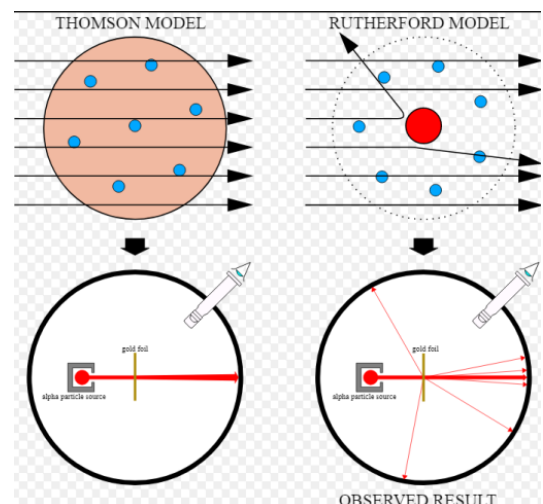
(\*: omdat hij veronderstelde dat gassen diatomisch zijn, moet de verhouding van een molecule  $O_2$  tot  $H_2$   $32 / 2$  zijn).

Vermits koolstofdioxide bestaat uit 27% C, bestaat koolstofdioxide uit 12g C en 32g O. Als de formule van koolstofdioxide  $CO_2$  zou zijn, bedraagt de relatieve atoommassa van C 12, indien de formule  $C_2O_2$  zou zijn, is de relatieve massa van C 6, etc... Met andere woorden: zolang de exacte formule niet gekend was,

kon de relatieve atoommassa ook niet worden bepaald. Door de relatieve moleculemassa en het percentage aan koolstof te bepalen van heel wat andere verbindingen, bleek gauw dat de relatieve massa aan koolstof altijd een veelvoud van 12 bedroeg, wat erop wijst dat de relatieve massa van C 12 moest zijn. Dit betekent dat de formule van koolstofdioxide  $\text{CO}_2$  is. De grote hoeveelheid verzamelde data bleek overtuigend genoeg.

De Engelse fysicus [Joseph John Thomson](#) (1856-1940) onderzocht de stralen geproduceerd in een kathodestraalbuï: wanneer een hoge spanning wordt aangelegd tussen twee elektroden in een buï, ontstond een 'straal' die afgebogen werd door de negatieve pool van een aangelegd elektrisch veld. Deze straal bestond volgens Thomson uit negatief geladen partikels: elektronen. Omdat deze elektronenstraal geproduceerd wordt uit elektroden van verschillende soorten metalen, concludeerde Thomson<sup>1</sup> dat alle atomen elektronen bevatten. Gezien atomen elektrisch neutraal zijn, bestond een atoom uit een positief geladen sfeer met daarin verspreide elektronen (plum pudding model). Robert Millikan slaagde er in 1909 in om de massa van een elektron te bepalen:  $9.11 \times 10^{-31}\text{kg}$ .

[Ernest Rutherford](#) voerde in 1911 een experiment uit om het model van Thomson na te gaan. Hij beschoot een dunne metalen folie met  $\alpha$ -straling<sup>2</sup>. Indien het atoommodel van Thomson correct was, was te verwachten dat de  $\alpha$ -partikels (heliumkernen) los door de folie zouden gaan, met minimale afbuiging. De resultaten waren echter niet zoals verwacht. Hoewel heel wat partikels door de folie gingen, werden heel wat  $\alpha$ -deeltjes afgebogen. De afbuiging van de  $\alpha$ -



<sup>1</sup> Dit model wordt toegeschreven aan J.J.Thomson, alhoewel het aanvankelijk eerst was geopperd door William Thomson (Lord Kelvin).

<sup>2</sup> Het was Antoine Henri Becquerel die in 1896 radioactiviteit ontdekte: bepaalde elementen – zoals bijvoorbeeld uranium - stuurden spontaan straling uit. In het begin van de 20<sup>ste</sup> eeuw ontdekte men dat er verschillende soorten radioactieve straling bestonden:  $\alpha$ -straling,  $\beta$ -straling en  $\gamma$ -straling. Een  $\gamma$ -straal is in feite hoogenergetisch 'licht', een  $\beta$ -straling bestaat uit hoog-energetische elektronen en  $\alpha$ -straling bestaat uit deeltjes met een lading  $2+$  (in feite zijn dit heliumkernen).

deeltjes kunnen verklaard worden door een centrum van geconcentreerde positieve ladingen, die zowat alle massa van het atoom uitmaken. De meeste deeltjes ging ongehinderd door de folie, omdat een atoom voor het grootste deel uit open ruimte bestaat. Rutherford stelde het nucleair atoom voor: een atoom met een dichte, positief geladen kern en elektronen die op een grote afstand van de kern draaien.

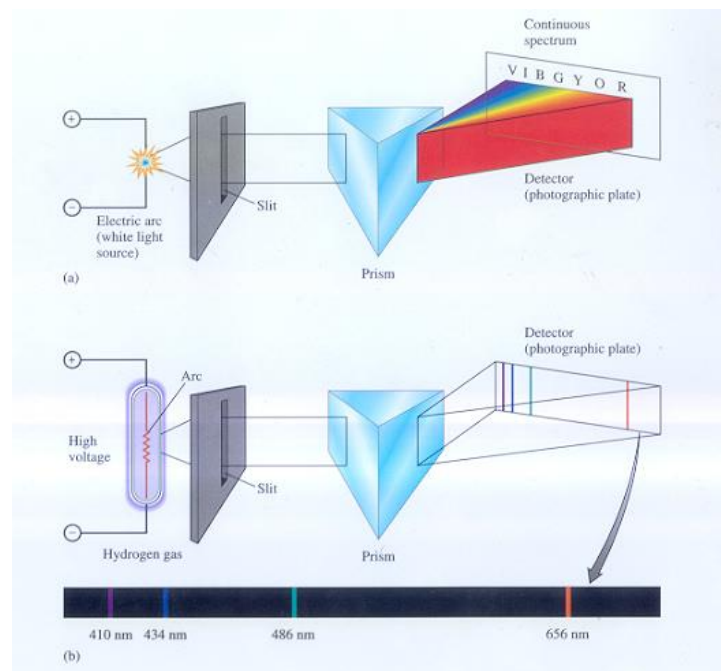
In de erop volgende jaren werden massa en grootte van de verschillende deeltjes bepaald:

- diameter kern: ca.  $10^{-13}$ cm
- afstand elektronen: ca.  $10^{-8}$ cm
- massa elektron  $9,11 \times 10^{-31}$  kg
- massa proton  $1.6726231 \times 10^{-27}$  kg, lading proton  $1,6 \times 10^{-19}$  C
- massa neutron<sup>3</sup>  $1.67493 \times 10^{-27}$  kg.

Bovenstaande toont aan dat de kern van een atoom bijzonder klein is in vergelijking tot de grootte van het atoom. Een atoomkern herschaalt tot de grootte van een erwt, zou ca. 250 miljoen ton wegen...

## 2. Het spectrum van waterstof en het atoommodel van Bohr

Wanneer wit licht door een prisma wordt gestuurd, ontstaat een continu spectrum<sup>4</sup> dat alle golflengte van het zichtbare licht naast elkaar toont (cf. een regenboog wanneer zonlicht door regendruppels straalt). Wanneer een hoeveelheid H<sub>2</sub>-gas<sup>5</sup> een grote hoeveelheid energie ontvangt, absorberen de H<sub>2</sub>-moleculen deze energie,

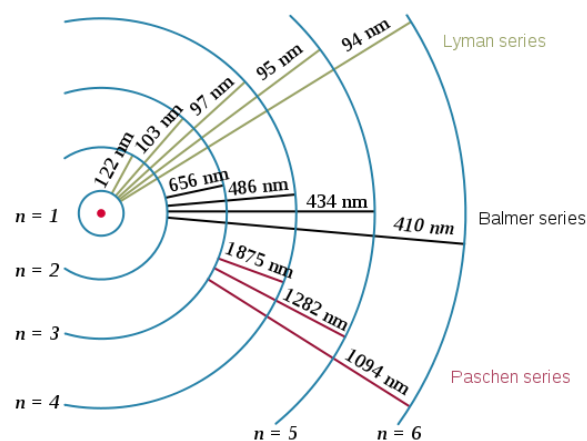


<sup>3</sup> Neutronen zijn in vrije toestand (buiten de atoomkern) niet stabiel, en vervallen tot een proton, elektron en een [elektron-antineutrino](#).

<sup>4</sup> Dit is een gevolg van het feit dat licht afgebogen wordt wanneer het door een ander medium gaat. De hoek waarmee het licht afbuigt, is afhankelijk van zijn frequentie. De golven met een verschillende frequentie zullen dus elk onder een iets andere hoek worden afgebogen, wat resulteert in de 'spreiding' van alle kleuren waaruit wit licht is samengesteld.

<sup>5</sup> Dit gaat natuurlijk enkel op voor gassen. Licht uitgestuurd door monoatomische vaste stoffen vertoont een [continu spectrum](#), door "storende" aanwezigheid van elektromagnetische velden van de naburige, dichtoengepakte atomen.

wordt de atoombinding verbroken en raken de H-atomen in een **aangeslagen** toestand. De atomen vallen terug naar de **grondtoestand** door het overschot aan energie uit te sturen als licht van verschillende golflengten. Wanneer dit licht door een prisma wordt gestuurd, ontstaat echter geen continue maar een lijnenspectrum. Dit betekent echter dat de energie van een elektron **gekwantiseerd** is: slechts welbepaalde energieveranderingen (energiesprongen) zijn mogelijk. Veranderingen in de discrete energiehoeveelheden in waterstof, veroorzaken welbepaalde golflengten. Als elke energieverandering mogelijk zou zijn, zou een continu spectrum worden uitgestuurd.



De Deen Niels Bohr formuleerde in 1913 een atoommodel voor het waterstofatoom. Hiermee trachtte hij een verklaring te bieden voor het lijnenspectrum van het waterstofatoom (op basis van het model van Rutherford zou een continu spectrum bekomen worden). Verder stelde hij dat het model van Rutherford een contradictie bevat:

- een elektron is een geladen deeltje. Geladen deeltjes die een versnelling ondergaan sturen voortdurend energie uit (onder de vorm van licht): wanneer een elektron rond de kern draait, verandert het voortdurend van richting. Het elektron ondergaat bijgevolg voortdurend een versnelling. Het elektron zou bijgevolg niet op zijn baan blijven en een spiraalvormige beweging maken, licht uitsturen en hierbij energie verliezen, om uiteindelijk op de kern te komen. Dit is echter niet de realiteit. Het atoommodel van Rutherford kan dus niet verklaard worden gebruik makende van de klassieke fysica.

Het atoommodel van Bohr voor het waterstofatoom, bestaat uit verschillende postulaten<sup>6</sup>.

**1<sup>ste</sup> postulaat:** elektronen bewegen in constante, cirkelvormige bewegingen rond de kern, waarbij hun energie constant blijft. Slechts welbepaalde banen zijn toegelaten.

Deze banen vormen de hoofdschillen en worden aangeduid met het hoofdkwantumgetal  $n$ , dat als waarden 1, 2, 3, 4, 5, 6 of 7 kan hebben.

**2<sup>de</sup> postulaat:** elektronen kunnen van baan veranderen (verspringen). De verandering van baan gaat gepaard met een energieverandering: verspringen naar een hogere baan gaat gepaard met absorptie van energie (het elektron bevindt zich dan in aangeslagen toestand), verspringen (terugvallen) naar een lagere baan (grondtoestand) gaat gepaard met emissie (uitsturen) van lichtenergie. De energie van het licht komt overeen met de energiesprong. Met elke energiesprong komt een welbepaalde frequentie (en golflengte) overeen → enkel licht van welbepaalde frequenties wordt opgenomen/uitgestuurd, vandaar het lijnenspectrum. De frequentie van het uitgestuurde licht is

$$\nu = \frac{E}{h}$$

De elektronen kunnen na excitatie niet alleen naar de eerste schil, maar ook naar de 2<sup>de</sup> of 3<sup>de</sup> schil terugvallen. Zo ontstaan verschillende lijngroepen, die elk een naam dragen (Lyman (naar K-schil), Balmer (naar L-schil), Paschen (naar M-schil) –serie).

**3<sup>de</sup> postulaat:** opdat een elektron op een stationaire baan zou blijven, moeten alle erop inwerkende krachten in evenwicht zijn. Zo kan men aantonen dat

$$r = cte \frac{n^2}{Z}$$

---

<sup>6</sup> Een postulaat is een niet bewezen, maar als grondslag aanvaarde stelling.



Met andere woorden, de straal is evenredig met het kwadraat van het schilnummer. Hoe hoger het schilnummer, hoe groter de straal. Indien het schilnummer constant blijft, dan daalt de straal met stijgend atoomnummer (in een periode op het periodieke systeem daalt de straal van links naar rechts).

Toepassing van dit model op andere atomen, leerde dat dit model fundamenteel incorrect is: elektronen draaien niet in cirkelvormige banen rond de kern. Historisch gezien was dit model wel belangrijk, niet alleen omdat het de weg effende voor de volgende theorieën, maar ook omdat het de kwantisatie van energie in atomen, door middel van eenvoudige assumpties kan verklaren.

### 3. Het atoommodel van Bohr-Sommerfeld

Verder onderzoek met andere elementen toonde aan dat het lijnenspectrum meer lijnen vertonen dan bij waterstof. Dit wijst op het bestaan van meer energieniveaus dan voorspelt door Bohr. Het atoommodel van Bohr werd uitgebreid: de hoofdniveaus kunnen opgesplitst worden in een aantal subniveaus, waarbij het aantal subniveaus per schil gelijk is aan de waarde van  $n$  (hoofdkwantumgetal). De verschillende subniveaus worden van elkaar onderscheiden door het nevenkwantumgetal of azimutaal kwantumgetal (symbool  $l$ ), dat de waarden 0 tot  $n-1$  kan aannemen. De verschillende subniveaus worden vaak door een letter voorgesteld:

$l=0 \rightarrow s$  (sharp)

$l=1 \rightarrow p$  (principal)

$l=2 \rightarrow d$  (diffuse)

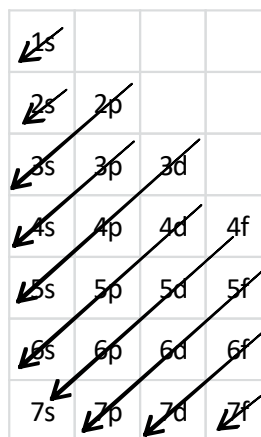
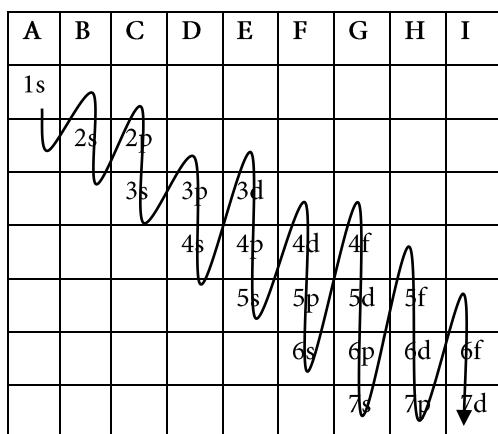
$l=3 \rightarrow f$  (fundamental)

Er blijken maximaal vier subniveaus te bestaan per schil. Deze subniveaus zijn ook aanwezig in de schillen van het element H, maar omdat H slechts een

elektron bevat, kunnen deze subniveaus niet van elkaar worden onderscheiden. Indien schillen meerdere elektronen bevatten, zullen door onderlinge afstoting de subniveaus een verschillende energie krijgen (en uit elkaar komen te liggen): pas dan zijn ze als afzonderlijke lijnen in het spectrum zichtbaar.

Binnen eenzelfde schil, kunnen vrij grote energiever schillen optreden tussen de subniveaus. Vanaf de derde schil kunnen deze energiever schillen zo hoog zijn, dat een subniveau van een hogere schil een lagere energie-inhoud heeft, dan een subniveau van een lagere schil.

De volgorde van de energie-inhoud van de verschillende subniveau's is belangrijk voor het opstellen van elektronenconfiguraties (zie verder) en kan onthouden worden volgens volgend schema, waarbij achtereenvolgens de kolommen A tot I doorlopen worden van boven naar beneden:



Uit spectraalanalyse werd het maximum aantal elektronen per subniveau bepaald:

s: 2 p:6 d:10 f:14

Wanneer het licht, alvorens door een prisma te stralen, door een magnetisch veld loopt, blijken de verschillende lijnen (die overeenkomen met subniveaus) verder opgesplitst te worden. Elk subniveau is bijgevolg opgebouwd uit een aantal magnetische toestanden, die in afwezigheid van een magnetisch veld eenzelfde energie-inhoud hebben. Het aantal magnetische toestanden is gelijk aan  $2l + 1$ , en deze magnetische toestanden worden aangeduid met een magnetisch kwantumgetal  $m$ , dat als waarden  $-l$  tot  $+l$

kan hebben. Op een magnetische toestand, kunnen maximaal twee elektronen aanwezig zijn.

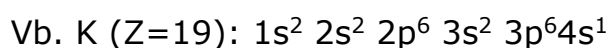
Later ontdekte men dat elektronen om hun eigen as tollen. De draaiing wordt aangegeven door middel van een vierde kwantumgetal – het spinkwantumgetal – dat twee mogelijke waarden kan aannemen:  $+1/2$  of  $-1/2$ . Tegengesteld draaiende elektronen trekken elkaar aan, elektronen die in eenzelfde zin draaien stoten elkaar af. Twee elektronen die op eenzelfde subniveau aanwezig zijn, zullen bijgevolg steeds een tegengestelde spin vertonen.

hoofdkwantumgetal	neven-azimutaal kwantumgetal		magnetisch kwantumgetal	aantal elektronen	max. aantal elektronen op subniveau	max. aantal elektronen op schil
n=1	l=0	1s	m=0	2	2	2
n=2	l=1	2p	m=0	2	6	8
			m=-1	2		
			m=1	2		
n=3	l=1	3p	m=0	2	6	18
			m=-1	2		
	l=2	3d	m=-2	2	10	
			m=-1	2		
			m=0	2		
			m=1	2		
n=4	l=2	4d	m=-2	2	10	32
			m=-1	2		
			m=0	2		
	l=3	4f	m=-3	2	14	
			m=-2	2		
			m=-1	2		
			m=0	2		
n=5	l=2	5d	m=-2	2	10	32
			m=-1	2		
			m=0	2		
	l=3	5f	m=-3	2	14	
			m=-2	2		
			m=-1	2		
			m=0	2		
			m=1	2		
			m=2	2		
n=6	l=2	6d	m=-2	2	10	18
			m=-1	2		
			m=0	2		
	l=1	6p	m=-1	2	6	
			m=0	2		
n=7	l=0	7s	m=0	2	2	2

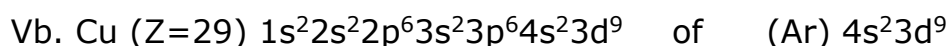
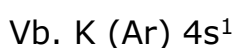
## 4. Elektronenconfiguratie

De elektronenconfiguratie geeft de verdeling van de verschillende elektronen over de verschillende energieniveaus weer. De elektronenconfiguratie van een element wordt afgeleid door de elektronen achter elkaar te plaatsen in de subniveaus in volgorde van toenemende energie (dit is het **Afbau**-principe: elektronenplaatsen zich steeds in de laagst mogelijke energietoestand).

De elektronenconfiguratie wordt voorgesteld door achtereenvolgens de verschillende bezette subniveaus te schrijven, met als exponent het aantal elektronen in elk van deze subniveaus.



Om deze symboliek te vereenvoudigen, wordt vaak het symbool van het edelgas dat het dichtst aan het onderzochte atoom voorafgaat, tussen haakjes geplaatst, gevolgd door de subniveaus die niet in het desbetreffende edelgas aanwezig zijn.



Hoger gegeven elektronenconfiguratie stemt echter niet overeen met de werkelijke elektronenconfiguratie van Cu, die  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1 3d^{10}$  is. Eén elektron is uit het s-niveau versprongen naar het d-niveau. Klaarblijkelijk verkrijgt het atoom een extra stabiliteit wanneer een d-subniveau half- of volledig is gevuld, wat aanleiding geeft tot afwijkingen op het **Afbau**-principe.

De hokjesvoorstelling is een meer uitgebreide voorstelling van de elektronenconfiguratie. Hierbij wordt elke energetische toestand voorgesteld door een hokje. Hokjes van energietoestanden met eenzelfde energie-inhoud

worden aan elkaar getekend. Elektronen worden voorgesteld door pijltjes in de hokjes. Per hokje/energetische toestand kunnen maximaal twee elektronen met tegengestelde zin/spin aanwezig zijn. Volgende zaken moeten steeds in aanmerking worden gebracht:

- uitsluitingsprincipe van **Pauli**: in een atoom verschillen elektronen altijd in minstens één van de vier kwantumgetallen. Dit betekent dat wanneer twee elektronen zich op eenzelfde magnetische toestand bevinden, zij een tegengestelde spin hebben;
- regel van **Hund**: binnen eenzelfde subniveau hebben de elektronen zoveel mogelijk dezelfde spin, of, anders geformuleerd, binnen eenzelfde subniveau verspreiden de elektronen zich zo dat een maximum aan ongepaarde elektronen voorkomt.

Vb. Cr (Z=24)

	1s <sup>2</sup>	2s <sup>2</sup>	2p <sup>6</sup>			3s <sup>2</sup>	3p <sup>6</sup>			4s <sup>1</sup>	3d <sup>5</sup>				
	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑	
n	11	22	22	22	22	33	33	33	33	4	3	3	3	3	3
l	00	00	11	11	11	00	11	11	11	0	2	2	2	2	2
m	00	00	-1-1	00	+1+1	00	-1-1	00	+1+1	0	-2	-1	0	+1	+2
s	+1/2-1/2	+1/2-1/2	+1/2-1/2	+1/2-1/2	+1/2-1/2	+1/2-1/2	+1/2-1/2	+1/2-1/2	+1/2-1/2	+1/2	+1/2	+1/2	+1/2	+1/2	+1/2

## 5. Het periodiek systeem

### 5.1. Historiek

Het huidige periodieke systeem is afgeleid van de tabel opgesteld door de Rus Dimitri Mendeleev (1834-190) in 1869. Mendeleev was de eerste die erin slaagde de elementen te rangschikken op een overzichtelijke en werkbare manier. Zijn periodieke systeem, dat aanvankelijk slechts 62 elementen bevatte, heeft niet alleen een praktisch belang – heel wat eigenschappen kunnen afgeleid worden uit de plaats van een element op het systeem – maar ook een historisch belang: het periodieke systeem heeft geleid tot de

ontdekking van een aantal ontbrekende elementen en de correctie van een aantal atoommassa's.

Mendeleev rangschikte de gekende elementen volgens stijgende atoommassa na elkaar, maar plaatste elementen met gelijkaardige eigenschappen onder elkaar. Indien het eerstvolgende element met hogere massa niet dezelfde eigenschappen had als het eerstvolgende bovenliggend element, liet hij een of meerdere posities open, omdat Mendeleev veronderstelde dat hier een nog niet gekend element thuishoorde. Van sommige toen nog niet gekende elementen kon Mendeleev de eigenschappen voorspellen.

Germanium	Voorspeld in 1871	Gevonden 1886
Atoommassa	72	72,3
Soortelijke massa	5,5	5,47
Formule oxide	XO <sub>2</sub>	GeO <sub>2</sub>
Soortelijke massa oxide	4,7	4,703
Formule chloride	XCl <sub>4</sub>	GeCl <sub>4</sub>
Kookpunt chloride	Onder 100°C	86°C
Formule fluoride	XF <sub>4</sub>	GeF <sub>2</sub>
Kookpunt ethylverbinding	160	160
Soortelijke massa ethylverbinding	0,96	0,96

Gebruik makend van de tabel, kon Mendeleev ook een aantal atoommassa's corrigeren. De atoommassa van indium (toen 76) was gebaseerd op de veronderstelling dat het oxide als formule InO had. Op basis van deze atoommassa werd In geplaatst bij de niet-metalen, terwijl het vooral metallische eigenschappen had. Mendeleev onderstelde bijgevolg dat de formule van indiumoxide In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> moest zijn, waardoor de atoommassa ca. 113 moest bedragen. Hierdoor kwam In bij de metalen terecht in het periodieke systeem.

## 5.2. Huidige opbouw van het periodieke systeem

In het huidige periodieke systeem worden elementen gerangschikt volgens stijgend atoomnummer (Z). Het atoomnummer was in de tijd van Mendeleev nog niet gekend, maar komt wel overeen met het rangnummer op de tabel van

Mendeleev. Rangschikking volgens stijgend atoomnummer, komt overeen met een rangschikking volgens stijgend aantal protonen, en bijgevolg een stijgende atoommassa en stijgend aantal elektronen. Bij een toenemend aantal elektronen worden steeds nieuwe schillen opgevuld, zodra een nieuwe schil wordt opgevuld, wordt een nieuwe rij op het periodieke systeem aangewend. Elementen met het laatst geplaatste elektron in een gelijkaardig subniveau (dezelfde elektronenconfiguratie van de valentie-elektronen), worden onder elkaar geplaatst. We zien dat elementen die onder elkaar geplaatst zijn, eenzelfde aantal en configuratie van elektronen op de buitenste schil hebben. Deze elektronen op de buitenste schil (en hun configuratie, vb. een p-niveau met 3 elektronen) bepalen grotendeels de eigenschappen van een element, en worden de valentie-elektronen genoemd.

De elementen met opvulling van het 2s orbitaal worden geplaatst onder de elementen waarbij het 1s orbitaal wordt opgevuld. Na de 2s volgt de opvulling van het 2p orbitaal (6 elementen: B→Ne). De elementen Na en Mg (opvulling 3s) en Al, Si, P, S, Cl en Ar (opvulling 3p) worden geplaatst onder de elementen waar het 2s of 2p wordt opgevuld. De elementen K en Ca (opvulling 4s) worden evenzo onder Na en Mg geplaatst. Na het 4s orbitaal wordt niet het 4p, maar wel het 3d orbitaal opgevuld (10 elektronen, 10 elementen). De elementen B→Ne en Al→Ar moeten dus 10 posities 'opgeschoven' worden, zodat de elementen Sc→Zn geplaatst kunnen worden. De volgende zes elementen (Ga→Kr) kennen een opvulling van het 4p-orbitaal en worden geplaatst onder de elementen waarbij het 2p- en 3p- orbitaal wordt opgevuld. Na de 4p komen twee elementen met een opvulling van het 5s-orbitaal, 10 elementen waarbij het 4d-orbitaal wordt opgevuld (en die geplaatst worden onder de elementen waarbij het 3d-orbitaal wordt opgevuld), 6 elementen waarbij het 5p-orbitaal, 2 elementen waarbij het 6s-orbitaal wordt opgevuld. Na het 6s-orbitaal wordt niet het 5d, maar wel het 4f-orbitaal opgevuld. Om te vermijden dat het periodieke systeem te breed wordt, worden de 14 elementen (lanthaniden) met een opvulling van het 4f-orbitaal onder het periodieke systeem geplaatst. Na opvulling van het 4f-orbitaal komen 10 elementen waarbij het 5d-orbitaal wordt opgevuld, vervolgens 6 elementen met een opvulling van het 6p-orbitaal, 2 elementen met opvulling van het 7s-orbitaal.

Na opvulling van het 7s-orbitaal wordt het 5f-orbitaal opgevuld. Deze elementen (actiniden) worden geplaatst onder de overeenkomstige elementen met een opvulling van het 4f orbitaal.

Hoewel de twee elektronen van He een s-niveau bezetten, wordt He geplaatst in groep 0, boven het element Neon. Helium heeft de eerste schil volledig bezet en heeft daarom dezelfde eigenschappen als de elementen Ne, Ar, Kr, etc...

Ia	IIa											IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	0	
H 1s <sup>1</sup>	He 1s <sup>2</sup>																	
Li 2s <sup>1</sup>	Be 2s <sup>2</sup>											B 2p <sup>1</sup>	C 2p <sup>2</sup>	N 2p <sup>3</sup>	O 2p <sup>4</sup>	F 2p <sup>5</sup>	Ne 2p <sup>6</sup>	
Na 3s <sup>1</sup>	Mg 3s <sup>2</sup>	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb				Ib	IIb	Al 3p <sup>1</sup>	Si 3p <sup>2</sup>	P 3p <sup>3</sup>	S 3p <sup>4</sup>	Cl 3p <sup>5</sup>	Ar 3p <sup>6</sup>
K 4s <sup>1</sup>	Ca 4s <sup>2</sup>	Sc 3d <sup>1</sup>	Ti 3d <sup>2</sup>	V 3d <sup>3</sup>	Cr 3d <sup>4</sup>	Mn 3d <sup>5</sup>	Fe 3d <sup>6</sup>	Co 3d <sup>7</sup>	Ni 3d <sup>8</sup>	Cu 3d <sup>9</sup>	Zn 3d <sup>10</sup>	Ga 4p <sup>1</sup>	Ge 4p <sup>2</sup>	As 4p <sup>3</sup>	Se 4p <sup>4</sup>	Br 4p <sup>5</sup>	Kr 4p <sup>6</sup>	
Rb 5s <sup>1</sup>	Sr 5s <sup>2</sup>	Y 4d <sup>1</sup>	Zr 4d <sup>2</sup>	Nb 4d <sup>3</sup>	Mo 4d <sup>4</sup>	Tc 4d <sup>5</sup>	Ru 4d <sup>6</sup>	Rh 4d <sup>7</sup>	Pd 4d <sup>8</sup>	Ag 4d <sup>9</sup>	Cd 4d <sup>10</sup>	In 5p <sup>1</sup>	Sn 5p <sup>2</sup>	Sb 5p <sup>3</sup>	Te 5p <sup>4</sup>	I 5p <sup>5</sup>	Xe 5p <sup>6</sup>	
Cs 6s <sup>1</sup>	Ba 6s <sup>2</sup>	La 5d <sup>1</sup>	Hf 5d <sup>2</sup>	Ta 5d <sup>3</sup>	W 5d <sup>4</sup>	Re 5d <sup>5</sup>	Os 5d <sup>6</sup>	Ir 5d <sup>7</sup>	Pt 5d <sup>8</sup>	Au 5d <sup>9</sup>	Hg 5d <sup>10</sup>	Tl 6p <sup>1</sup>	Pb 6p <sup>2</sup>	Bi 6p <sup>3</sup>	Po 6p <sup>4</sup>	At 6p <sup>5</sup>	Rn 6p <sup>6</sup>	
Fr 7s <sup>1</sup>	Ra 7s <sup>2</sup>	Ac 6d <sup>1</sup>																

Ce 4f <sup>1</sup>	Pr 4f <sup>2</sup>	Nd 4f <sup>3</sup>	Pm 4f <sup>4</sup>	Sm 4f <sup>5</sup>	Eu 4f <sup>6</sup>	Gd 4f <sup>7</sup>	Tb 4f <sup>8</sup>	Dy 4f <sup>9</sup>	Ho 4f <sup>10</sup>	Er 4f <sup>11</sup>	Tm 4f <sup>12</sup>	Yb 4f <sup>13</sup>	Lu 4f <sup>14</sup>
Th 5f <sup>1</sup>	Pa 5f <sup>2</sup>	U 5f <sup>3</sup>											

Het periodiek systeem valt dus uiteen in een aantal 'blokken':

- het s-blok (hoofdgroep Ia en IIa): bevat elementen waarbij het s-niveau van de laatste schil wordt opgevuld;
- het p-blok (hoofdgroepen IIIa, IVa, Va, VIa, VIIa en 0): bevat elementen waarbij het p-niveau van de laatste schil wordt opgevuld;
- het d-blok (overgangselementen of transitie-metalen, de b-groepen): bevat elementen waar het d-niveau van de voorlaatste schil wordt opgevuld;
- het f-blok (zeldzame aardmetalen): elementen waarvan het f-niveau van schil n-2 wordt opgevuld.



De nummering van de transitie-metalen/overgangselementen (b-groepen) lijkt op eerste zicht weinig logisch. Groepen IIIb tot VIIIb moeten respectievelijk een aantal elektronen afgeven gelijk aan het nummer om de edelgasconfiguratie te bereiken. Omdat in termen van de octetstructuur gedacht wordt in termen van acht elektronen, kregen groepen IXb en Xb het nummer VIIIb. Groepen Ib en IIb kunnen een stabiele elektronenconfiguratie verkrijgen (volledig opgevuld d-niveau) door het afstaan van respectievelijk 1 of twee elektronen.

Omdat slechts 7 schillen mogelijk zijn, zijn er slechts zeven horizontale rijen of perioden. Elementen die onder elkaar zijn gerangschikt, vormen groepen. Zij hebben, zoals hoger gesteld, eenzelfde aantal elektronen op de buitenste schil (valentie-elektronen) en deze elektronen hebben eenzelfde elektronenconfiguratie. Elementen met eenzelfde aantal valentie-elektronen vormen groepen, we onderscheiden de alkalimetalen (Ia), aardalkalimetalen (IIa), aardmetalen (IIIa), koolstofgroep (IVa), stikstofgroep (Va), zuurstofgroep (VIa), halogenen (VIIa) en edelgassen (0).

In het huidige periodieke systeem worden elementen aldus gerangschikt volgens:

- toenemend atoomnummer;
- nieuwe rij= nieuwe schil;
- elementen met laatst geplaatst elektron in zelfde energietoestand worden onder elkaar geplaatst<sup>7</sup>.

### 5.3. Gebruik

Een aantal eigenschappen van elementen kunnen afgeleid worden in overeenstemming met hun plaats op het periodieke systeem.

---

<sup>7</sup> De elektronenconfiguratie voorspellen van de transitie-metalen (overgangsmetalen) is niet altijd mogelijk. Er zijn nogal wat uitzonderingen op het Afbau-principe. Omdat de 4f en 5d orbitalen een gelijkaardige energie hebben, bezetten bij lanthaniden elektronen soms een 5d niveau in plaats van een plaats in het verwachte 4f-niveau. Ook bij de actiniden, bezetten één of twee elektronen soms een 6d niveau in plaats van het 5f-niveau, omdat de energieniveaus zeer dicht bijeen liggen.

### 5.3.1. Atoomstraal

In een groep stijgt de atoomstraal van de elementen van boven naar beneden, als gevolg van een toenemend aantal schillen. Bovendien is  $r$  evenredig met  $n^2/Z$ , door het kwadraat is het effect van het schilnummer groter dan dat van het atoomnummer.

In een periode neemt de straal van de elementen af van links naar rechts. Dit kan op verschillende manieren verklaard worden:

- de straal is evenredig met  $n^2/Z$ , het aantal schillen is constant,  $Z$  stijgt, dus  $r$  wordt kleiner;
- de straal wordt kleiner omdat de afschermdende werking van de voorlaatste schil kleiner wordt (de lading van de kern wordt groter, het aantal niet-valentie-elektronen blijft gelijk, waardoor de valentie-elektronen relatief harder worden aangetrokken door de kern).

Elementen van de transitie-metalen en zeldzame aardmetalen kennen een opvulling van het d- en f-niveau (meer naar binnen gelegen schillen). De afscherming wordt daardoor iets groter zodat de atoomstralen groter zijn. Bij deze groepen treden een aantal onregelmatigheden op, de verklaring hiervoor valt buiten het bereik van deze cursus.

### 5.3.2. Elektronegativiteit

De elektronegatieve waarde (EN) of elektronegativiteit is een onbenoemd getal dat de neiging van een element uitdrukt om elektronen naar zich toe te trekken.

In een groep daalt de elektronegativiteit van boven naar beneden, in een periode stijgt ze van links naar rechts.

## 6. Materie en energie

Tot ca. 1900 was heerst de opvatting dat materie en energie duidelijk verschillende entiteiten waren. In 1901 toonde [Max Planck](#) (1858-1947) echter aan dat energie **gekwantiseerd** is: energie bestaat uit kleine discrete hoeveelheden of kwanta. Energie kan enkel opgenomen of afgestaan worden in gehele veelvoud van de hoeveelheid  $h\nu$  (waarbij  $h$  = de constante van Planck,  $6.626 \times 10^{-34}$  Js).

[Albert Einstein](#) (1879-1955) stelde – op basis van het foto-elektrisch effect – dat elektromagnetische straling zelf gekwantiseerd is en gezien kan worden als een stroom van partikels, fotonen genaamd. Licht heeft aldus een dubbel karakter. Het golfkarakter kan de typische verschijnselen als interferentie ('optellen' van golven) en diffractie (afbuigen van licht) verklaren. Het foto-elektrisch effect van licht kan enkel verklaard worden op basis van het deeltjeskarakter<sup>8</sup>.

De energie van een foton hangt af van zijn golflengte:

$$E = h\nu = hc/\lambda \quad (1)$$

In 1905 kon Einstein ook aantonen dat energie een massa had:

$$E=mc^2 \quad (2)$$

Uit (1) en (2) kan de massa geassocieerd met een hoeveelheid energie worden berekend:

$$m = E/c^2 = hc/\lambda c^2 = h/\lambda c$$

Uit het werk van Einstein en Planck volgt dus dat energie gekwantiseerd is: ze kan enkel overgedragen worden in kleine, discrete hoeveelheden of kwanta. Verder blijkt licht een duaal karakter te hebben: het vertoont naast golfeigenschappen, ook bepaalde kenmerken van materie.

---

<sup>8</sup> Einstein was niet de eerste geleerde die het deeltjeskarakter van licht voorstelde. Isaac Newton had dit ook al voorgesteld. Einstein was echter de eerste geleerde die het deeltjeskarakter onomstotelijk kon aantonen.

In 1923 kon [Louis de Broglie](#) (1892-1987) aantonen dat elke materiedeeltje<sup>9</sup>, ook golfeigenschappen vertoont. Zo zijn is een zaak, begrijpen is een andere zaak. Want hoe de deeltjes gedragen – als golf of als materie – hangt af van of ze geobserveerd worden of niet (zie filmpjes onderaan). Geen ramp als je dit niet kunt vatten, het is quantummechanica en het is maar de vraag of iemand dit kan vatten.

De relatie tussen massa en golf is:

$$\lambda = h / mv$$

Tegenwoordig is het duidelijk dat het onderscheid tussen materie en energie niet duidelijk is afgelijnd. Wel kan men stellen dat grote materiedeeltjes, vooral materie-eigenschappen vertonen, de geassocieerde golf is zo klein dat ze niet geobserveerd kan worden. Bijzonder kleine materiedeeltjes zoals fotonen, vertonen vooral golfeigenschappen.

## 7. Het onzekerheidsprincipe van Heisenberg

Om de beweging van een elektron (of enig ander voorwerp) nauwkeurig te beschrijven, moet op ieder ogenblik zijn plaats en snelheid gelijktijdig zijn gekend. Door een elektron te beschieten met een hoogenergetisch foton, kan haar plaats nauwkeurig worden bepaald, maar wordt haar snelheid gewijzigd. Door een elektron te bestralen met een laagenergetisch foton, kan de snelheid nauwkeurig worden bepaald maar wordt de plaats van het elektron gewijzigd. Met andere woorden, wanneer men de snelheid nauwkeurig wil bepalen, wordt de plaats van het elektron gewijzigd, en omgekeerd. Dit is geen kwestie van onnauwkeurige meettoestellen: wiskundig en fysisch kan worden bewezen dat het onmogelijk is om plaats en snelheid van een elektron nauwkeurig te bepalen. De Duitse fysicus Heisenberg formuleerde het onzekerheidsprincipe: het is onmogelijk om gelijktijdig de snelheid en positie van een elektron te bepalen. De fout op de positie wordt groter naarmate de fout op de impuls

---

<sup>9</sup> Zie o.a. <https://www.youtube.com/watch?v=TT-uCLwKhQ> & <https://www.youtube.com/watch?v=DfPeprQ7oGc>. Wanneer elektronen worden afgevuurd op een dubbelspleet, ontstaat ook een interferentiepatroon. Dit kan niet verklaard worden wanneer elektronen materiedeeltjes zijn, wel als men elektronen als golven aanschouwd.

(snelheid x massa) wordt verkleind, en omgekeerd. Heisenberg kon aantonen dat

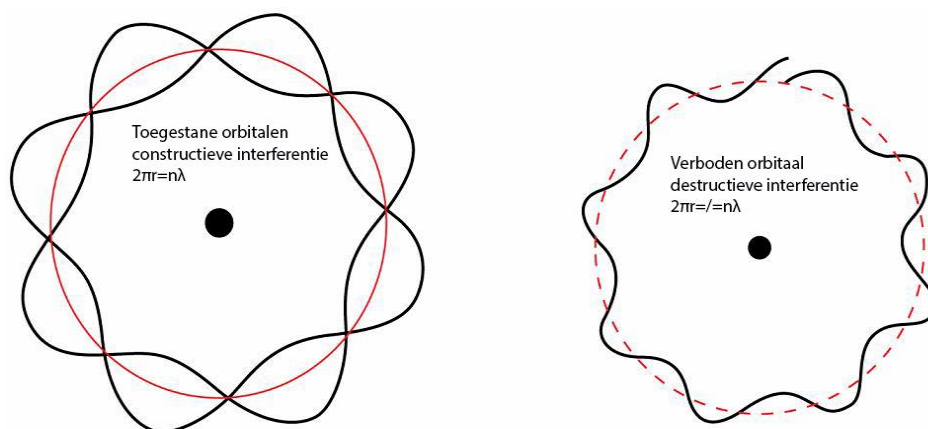
$$\Delta x \cdot m\Delta v = cte = h / 4\pi$$

Dit betekent dat de 'stationaire baan', waarvan sprake in de postulaten van Bohr, niet controleerbaar is. Men kan enkel een gebied met een zekere mate van waarschijnlijkheid om een elektron aan te treffen, aanduiden. De redenering van Bohr blijft, maar het begrip baan (dat een exacte snelheid en positie impliceert) moet vervangen worden door het begrip **atoomorbitaal**: dit is de meest waarschijnlijke ruimte waarin een elektron zich bevindt.

## 8. Het golfmechanisch model van een atoom (zie ook

Zoals hoger beschreven, blijkt materie een dubbel karakter te hebben. Een elektron heeft naast een deeltjeskarakter, ook een [golfkarakter](#). Dit betekent dat als een elektron rond de kern beweegt, de golf zich volgens de omtrek zal voortplanten. Een elektron is maar stabiel als die golf een staande golf is (knooppunten zijn gelijk en er is geen faseverschil na de omwenteling), zoniet heft de golf zichzelf op (interferentie met zichzelf). Om aan die voorwaarde te voldoen, moet de omtrek van het orbitaal, een geheel aantal keer de golflengte zijn, m.a.w.:

$$2\pi r = n\lambda$$



## 9. Vergelijkingen van Schrödingen

Schrödingen breidde de theorie uit tot golven die zich in de ruimte rond de kern bewegen (3D-staande golf). Om tot een ruimtelijk beeld van deze orbitalen te komen, stelde hij een reeks wiskundige vergelijkingen (golffuncties) op. Deze golffuncties blijken echter slechts oplosbaar door bepaalde parameters in te voeren, door bepaalde waarden in te vullen voor de energie van het elektron. Deze parameters stemmen overeen met de vier kwantumgetallen nodig om het lijnenspectrum te verklaren.

Het resultaat van deze vergelijkingen is een waarschijnlijkheidsverdeling om een elektron in de ruimte aan te treffen (een ruimte waarin een elektron met een zekere waarschijnlijkheid kan worden aangetroffen). De ruimtelijke vorm van deze orbitalen is echter verschillend aan de banen beschreven door Bohr (circulaire).

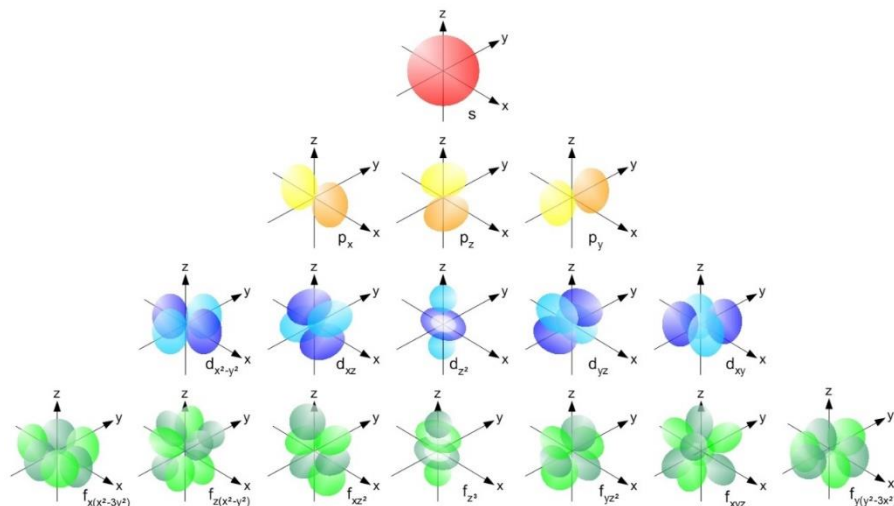
Het hoofdkwantumgetal  $n$  komt in de vergelijkingen van Schrödingen overeen met de 'grootte' van het orbitaal, het nevenkwantumgetal is bepalend voor de vorm:

s: bolvormig

p: haltervormig (twee lobben)

d: 3D klaverbladvormig (4-d orbitalen bestaan uit 4 lobben, de 5de uit twee lobben en een 'gordel')

f: complexe vormen (de 7 f-orbitalen hebben een nog complexere vorm dan de d-orbitalen).



Het magnetisch kwantumgetal bepaalt de oriëntatie in de ruimte of oriëntatie in de richting van het magnetisch veld, het spinkwantumgetal bepaalt de spin van het elektron.