# Molecuulbouw en stofeigenschappen

## Lewisstructuren

### Lewisstructuur opstellen (normaal en ion)

Lewisstructuren zijn molecuulstructuren waarin de elektronen in de buitenste schil zichtbaar weergegeven zijn. Deze elektronen bepalen oa de covalentie en het soort binding.

● staat voor een elektron. Een binding tussen 2 atomen wordt gevormd door twee elektronen. Deze elektronen vormen een gezamenlijk elektronenpaar en worden dus aan beide atomen toebedeeld.

Een dubbele binding wordt gevorm door 4 elektronen, deze 4 vormen samen ook een gezamenlijk elektronenpaar. Alle elektronen worden aan beide stoffen toebedeeld.

Een driedubbele binding wordt gevormd door 6 elektronen, deze 6 vormen samen ook gezamenlijke elektronenparen en worden dus ook weer aan beide atomen toebedeeld.

Stappenplan opstellen lewisstructuur CO2:

1. Bepaal het aantal valentie-elektronen

Koolstof-atoom: 4 valentie-elektronen

Zuurstof-atoom: 6 valentie-elektronen

Totaal is dus

1. Bereken hoeveel elektronen nodig zijn om alle elektronen te laten voldoen aan de octetregel

Koolstof-atoom: 8 elektronen

Zuurstof-atoom: 8 elektronen

Totaal is dus

1. Bereken hoeveel elektronen je tekort komt

Tekort:

1. De tekortkomende elektronen worden verkregen door verbindingen aan te gaan

* Zuurstof-atomen gaan dubbele verbinding met koolstof aan en krijgen daardoor 2 elektronen extra
* Koolstof-atoom gaat dubbele binding met zuurstof aan en verkrijgt daardoor 4 extra elektronen

Geen vrije elektronenparen dus een hoek van 180 graden tussen de atomen

Bij ionen heb je een extra elektronen/extra elektronen, deze elektronen voeg je toe of haal je af van de valentie-elektronen.

### Lewisstructuur van een ion

De lewisstructuur

### VSEPR

De hoek die gemaakt wordt door atomen die een molecuul vormen is ongeveer gelijk bij alle moleculen.

Deze hoek hangt van de covalentie van het atoom af

|  |  |
| --- | --- |
| covalentie | gemaakte hoek |
| 2 | 180 graden |
| 3 | 120 graden |
| 4 | 109 graden |

### Dipolen

Afhangend van het aantal vrije elektronen van een atoom is een molecuul soms een dipool-molecuul. Dit houdt in dat de VESPR zoms afwijkt dan verwacht zou worden bij een bepaalde covalentie.

Bij covalentie 2 wordt een hoek van 180 graden verwacht. Bij h20 wordt echter een hoek van 120 graden gemaakt doordat het zuurstof-atoom 2 valentie-elektronen heeft waardoor de 2 h-atomen schuin naar beneden gericht zijn.

## Mesomerie

Mesomerie houdt in dat van eenzelfde molecuul verschillende lewis-structuren getekend kunnen worden. Dit kan doordat de elektronenparen zich kunnen verplaatsen binnen een molecuul.

Opstellen van mesomere grensstructuren

* Teken eerst de basis lewisstructuur. 🡪 nog geen extra elektronen plaaten ed.
* Deel vervolgens de extra elektronen in
* Teken alle mogelijke vormen waarbij bindende elektronenparen niet-bindende elektronenparen worden en ook andersom.
* Het molecuul moet wel blijven voldoen aan:
  1. De octetregel
  2. En het molecuul moet de juiste formele lading hebben

## Substitutie- en additiereacties

### Substitutiereacties

Bij substitutie wordt een atoom of groep aan een molecuul vervangen door een andere atoom of groep. Dit gaat volgens 2 verschillende mechanismen:

* Radicaalmechanisme:

1. **Initiatie**: Uv-straling laat een molecuul splitsen waardoor een radicaal ontstaat. Deze voldoet niet aan de octetregel en is dus zeer ractief
2. **Propagatie**: een radicaal reageert met een zijgroep of atoom 🡪 zijgroep of atomen splitsen af 🡪 Hierdoor ontstaat een tweede radicaal. Deze reageert met de overgebleven stof en hierdoor onstaat een nieuwe stof.
3. **Terminatie**: de twee radicalen reageren met elkaar waardoor niet meer verder gereageerd kan worden.

* Ionair mechanisme

Hierbij verschuiven elektronenparen waardoor een atoom of zijgroep vervangen kunnen worden. Dit wordt weergegeven door de verschuiving van elektronenparen weer te geven bij een Lewis-weergave. Voor een ionair mechanisme is een nucleofiel molecuul nodig en een elektrofiel molecuul. Deze twee zijn dus beide naar elkaar op zoek. De ene zoekt een kern en de andere een elektron welke zij dus beide over hebben.

### Additiereacties

* Radicaalmechanisme

1. Initiatie: eerst wordt vanuit de groep die bijgeplakt gaat worden radicalen gevormd door de latere zijgroep op de delen
2. Propagatie: de beginstof reageert met de radicaal waardoor de beginstof zelf een radicaal vormt 🡪 deze radicaal reageert met de met de stof die de eerdere radicalen vormde 🡪 vervolgens ontstaat er dus een stof waarbij de radicaal van een beginstof bij de andere stof is gevoegd
3. Terminatie: de ene radicaal uit stap 2 reageert met de overgebleven radicaal uit stap 1 🡪 de stof is klaar met reageren

* Ionair mechanisme

De ene stof is nucleofiel en de andere elektrofiel waardoor ze elkaar aantrekken en aan elkaar binden.

Additiereacties kunnen verlopen met:

* Halogenen (F2, Cl2, Br2 en I2)
* Waterstofhalogeniden (HF, HCl, HBr en HI)
* Waterstof en water (H-OH)

### 1,2 en 1,4 additie

Bij 1,2 en 1,4 additie klapt een dubbele binding open waardoor er een atoom aan het molecuul kan binden.

Bij 1,2 additie zijn de bindingen 1,2 en 3,4 dubbele bindingen die open kunnen klappen

Dus:

C=C-C=C

Waarbij dus bij de eerste C en de 2e C een extra atoom kan binden doordat er bij het verdwijnen van een dubbele binding aan beide kanten van de binding een elektron vrijkomt.

1,2 additie kan dus ook twee keer plaatvinden in theorie doordat er twee keer een dubbele binding in de stof zit.

Bij 1,4 additie is de stof meestal net iets anders opgebouwd. Meestal bestaat de stof hieruit:

C-C+-C=C, de stof kan nu nog geen 1.4 additie laten plaatsvinden. Echter kan de dubbele binding ook hier weer omslaan waardoor C-C=C-C+ ontstaat.

Nu kan aan de losse + bij de 4e C een atoom binden. Hierdoor ontstaat dus 1,4-additie

## Cis-trans-isomerie

bij een molecuul waarbij een dubbele binding tussen twee atomen zit waaraan aan beide losse atomen ook 2 zijgroepen of atomen zitten waarvan de vier verschillende groepen/atomen er twee gelijk zijn.

Vb.

H H

\ /

C = C cis-isomerie

/ \

Cl Cl

Cl H

\ /

C = C trans-isomerie

/ \

H Cl

Door de dubbele binding in het midden kunnen de H en Cl niet van plek wisselen (de C kan niet omdraaien) daardoor zijn dus twee moleculen met exact dezelfde verdeling toch anders van structuur. Dit zijn dan ook stereo-isomeren. Ze hebben een gelijke molecuulbouw maar een verschillende ruimtelijke oriëntatie.

Bij de stof C2H4Cl2

Zijn er twee mogelijke molecuulstructuren

Cl Cl

| |

H ---- C ------ C ---- H

| |

H H

Cl H

| |

Cl ---- C ------ C ---- H

| |

H H

De molecuulformules zijn gelijk maar de stoffen hebben toch andere stofeigenschappen.

## Spiegelbeeldisomerie

Moleculen waarvan het spiegelbeeld niet gelijk is aan het orspronkelijke molecuul noem je spiegelbeeld isomeren. Spiegelbeeld isomerie is een vorm van stereo-isomerie

Het assymetrische koolstofatoom zorgt ervoor dat een molecuul sowieso spiegelbeeldisomerie bevat, bij de c zet je dan ook een \* waarmee je dit aangeeft.

Een assymmetsich koolstof atoom is een assymmetsich koolstof atoom als er een koolstof atoom is met aan de elke van de vier bindingen een andere atoom/groep.