

Tentamen Algemene en Anorganische Chemie

02 november 2010

Naam:.....

Studentnummer Universiteit Leiden:

Dit is de enige originele versie van jouw tentamen. Het bevat dit voorblad, enkele pagina's met informatie en vervolgens de opgaven.

Gebruik kladpapier om je antwoord uit te werken. Neem daarna de berekening, tekening of ander antwoord over op dit origineel. Lever slechts dit origineel in.

SUCCES!

Resultaten:

Opgave 1	Opgave 2	Opgave 3
/35	/35	/30

Totaal:

/100

Cijfer:

Fundamentele constanten en omrekeningsfactoren:

Elementaire lading:	$e = 1,602176462 \times 10^{-19} \text{ C}$
Atomaire massa-eenheid:	$1 \text{ amu} = 1,66053873 \times 10^{-24} \text{ g}$
Getal van Avogadro:	$N = 6,02214199 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Gasconstante:	$R = 8,314 \text{ J/mol-K}$ $R = 0,082058205 \text{ L-atm/mol-K}$
Omrekening gasdruk	$1 \text{ atm} = 760 \text{ mm Hg}$
Constante van Boltzmann:	$k = 1,3806503 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Constante van Faraday:	$F = 9,64853415 \times 10^4 \text{ C/mol}$
Lichtsnelheid:	$c = 2,99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$
Constante van Planck:	$h = 6,62606876 \times 10^{-34} \text{ J-s}$
Omrekening Debye:	$1 \text{ D} = 3,34 \times 10^{-30} \text{ Cm}$
Inhoud bol	$= \frac{4}{3} \pi r^3$

Formules:

Wet van Coulomb:	$F(r) = (4\pi\epsilon_0)^{-1} * (Q_1 Q_2 / r^2)$
Coulomb energie:	$E(r) = (4\pi\epsilon_0)^{-1} * (Q_1 Q_2 / r)$
Dipoolmoment:	$\mu = Q * r$
Elektronegativiteit (Allred en Rochow):	$\chi = 0,359 Z^* / r^2 + 0,744$ (met r in Angström, Å)
Lichtsnelheid en frequentie:	$c = \lambda \nu$
Energie van een foton:	$E = h\nu$
Hoeksnelheid en frequentie:	$\omega = 2\pi\nu$
Waterstofatoom:	$\Delta E = -2,18 * 10^{-18} * [(1/n_f^2) - (1/n_i^2)]$
De Broglie golflengte	$\lambda = h / (mv)$
Heisenberg onzekerheidsrelatie	$(\Delta x)(\Delta mv) \geq h/4\pi$
Traagheidsmoment van een rotor:	$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 + m_3 r_3^2 + \dots$ $I = \mu R_{A-B}^2$ (tweeatomige AB) $I = 2m_A R_{A-B}^2$ (lineair A-B-A)
Rotatieconstante:	$B = h / (8\pi^2 c I)$ (B gewoonlijk in cm^{-1})
Rotationele energie (lineaire rotor):	$F(J) = hc B J(J+1)$ (F gewoonlijk in cm^{-1})
Vibratoire energie:	$E(v) = (v+0.5)h\nu$ (E gewoonlijk in cm^{-1} of kJ/mol)
Enthalpie:	$H = E + PV$
Gibbs vrije energie:	$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$
Entropie:	$S = k \ln W$
Systeem uit evenwicht:	$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln Q$
Henderson-Hasselbalch	$\text{pH} = \text{pKa} + \log ([\text{base}] / [\text{zuur}])$

Bindingenergieën (kJ/mol)

C-H	413
C-C	348
C-N	293
C-O	358
C-F	485
C-Cl	328
C-Br	276
C-I	240
C-S	259

N-H	391
N-N	163
N-O	201
N-F	272
N-Cl	200
N-Br	243
H-H	436
H-F	567
H-Cl	431
H-Br	366
H-I	299

O-H	463
O-O	146
O-F	190
O-Cl	203
O-I	234
S-H	339
S-F	327
S-Cl	253
S-Br	218
S-S	266

F-F	155
Cl-F	253
Cl-Cl	242
Br-F	237
Br-Cl	218
Br-Br	193
I-Cl	208
I-Br	175
I-I	151

C=C	614
C≡C	839
C=N	615
C≡N	891
C=O	799
C≡O	1072

N=N	418
N≡N	941
N=O	607

O ₂	495
S=O	523
S=S	418

Thermodynamische gegevens

stof	ΔH_f° (kJ/mol)	ΔG_f° (kJ/mol)	S° (J/molK)
CH _{4(g)}	-74.8	-50.8	186.3
CH _{3OH(l)}	-238.6	-166.23	126.8
CH _{3OH(g)}	-201.2	-161.9	237.6
CO(g)	-110.5	-137.2	197.9
CO _{2(g)}	-393.5	-394.4	213.6
H _{2(g)}	0	0	130.58
H _{2O(l)}	-285.83	-237.13	69.91
H _{2O(g)}	-241.82	-228.57	188.83

Periodiek Systeem

The Modern Periodic Table of the Elements

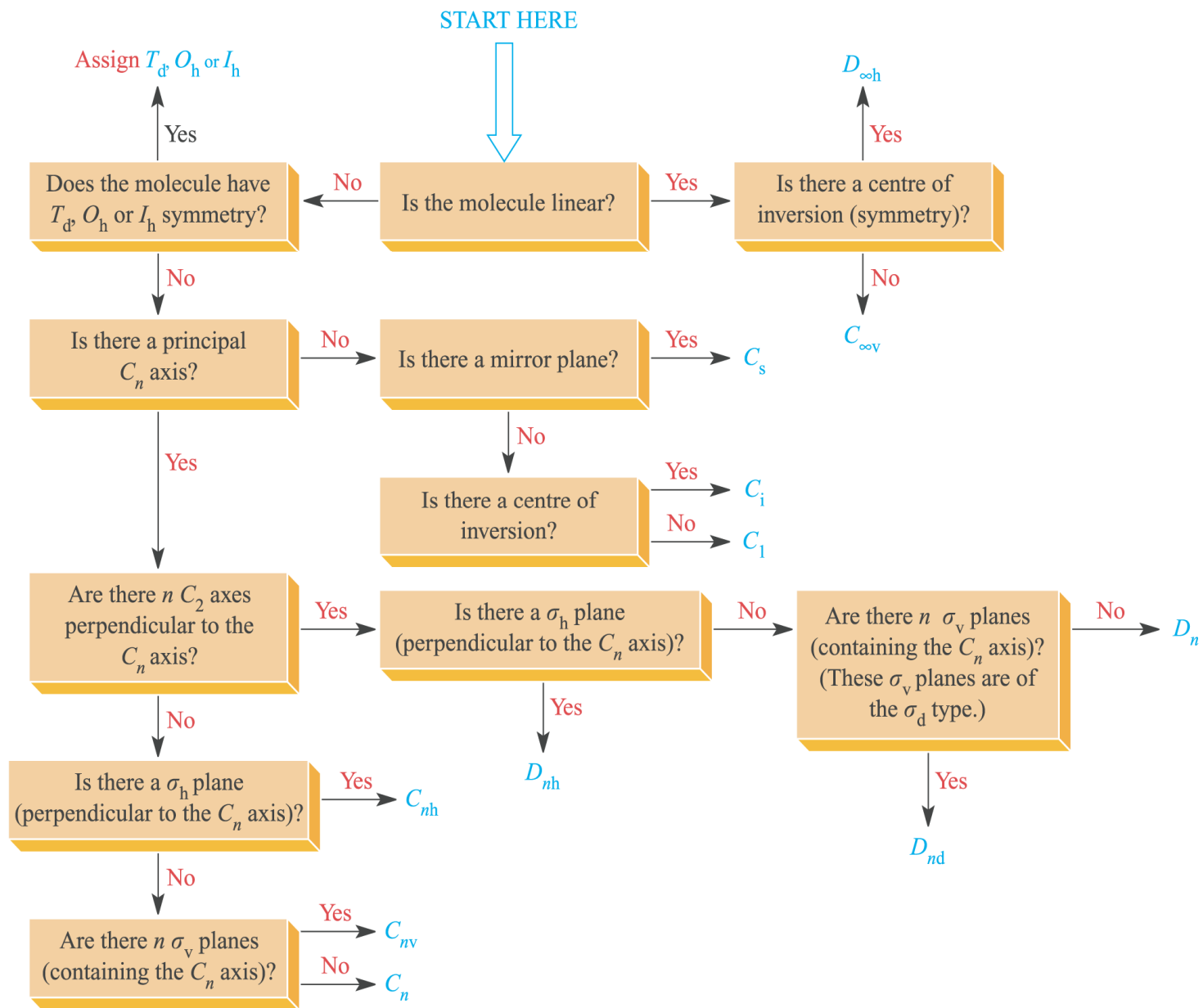
Average relative masses are 2001 values, rounded to two decimal places.

All average masses are to be treated as measured quantities, and subject to significant figure rules. Do not round them further when performing calculations.

Element name → Mercury
Atomic # ← 80
Symbol → Hg
Avg. Mass ← 200.59
Electronegativity → 1.9

1																	18						
Hydrogen 1 H 1.01 2.1																	Helium 2 He 4.00						
Lithium 3 Li 6.94 1.0	Beryllium 4 Be 9.01 1.5																	Boron 5 B 10.81 2.0	Carbon 6 C 12.01 2.5	Nitrogen 7 N 14.01 3.0	Oxygen 8 O 16.00 3.5	Fluorine 9 F 19.00 4.0	Neon 10 Ne 20.18
Sodium 11 Na 22.99 0.9	Magnesium 12 Mg 24.31 1.2																	Aluminum 13 Al 26.98 1.5	Silicon 14 Si 28.09 1.8	Phosphorus 15 P 30.97 2.1	Sulfur 16 S 32.07 2.5	Chlorine 17 Cl 35.45 3.0	Argon 18 Ar 39.95
Potassium 19 K 39.10 0.8	Calcium 20 Ca 40.08 1.0	Scandium 21 Sc 44.96 1.3	Titanium 22 Ti 47.88 1.5	Vanadium 23 V 50.94 1.6	Chromium 24 Cr 52.00 1.6	Manganese 25 Mn 54.94 1.5	Iron 26 Fe 55.85 1.8	Cobalt 27 Co 58.93 1.8	Nickel 28 Ni 58.69 1.8	Copper 29 Cu 63.55 1.9	Zinc 30 Zn 65.39 1.6	Gallium 31 Ga 69.72 1.6	Germanium 32 Ge 72.61 1.8	Arsenic 33 As 74.92 2.0	Selenium 34 Se 78.96 2.4	Bromine 35 Br 79.90 2.8	Krypton 36 Kr 83.80 3.0						
Rubidium 37 Rb 85.47 0.8	Strontium 38 Sr 87.62 1.0	Yttrium 39 Y 88.91 1.2	Zirconium 40 Zr 91.22 1.4	Niobium 41 Nb 92.91 1.6	Molybdenum 42 Mo 95.94 1.8	Technetium 43 Tc (98) 1.9	Ruthenium 44 Ru 101.07 2.2	Rhodium 45 Rh 102.91 2.2	Palladium 46 Pd 106.42 2.2	Silver 47 Ag 107.87 1.9	Cadmium 48 Cd 112.41 1.7	Indium 49 In 114.82 1.7	Tin 50 Sn 118.71 1.8	Antimony 51 Sb 121.76 1.9	Tellurium 52 Te 127.60 2.1	Iodine 53 I 126.90 2.5	Xenon 54 Xe 131.29 2.6						
Cesium 55 Cs 132.91 0.7	Barium 56 Ba 137.33 0.9	57-70 *	Lutetium 71 Lu 174.97 1.1	Hafnium 72 Hf 178.49 1.3	Tantalum 73 Ta 180.95 1.5	Tungsten 74 W 183.84 1.7	Rhenium 75 Re 186.21 1.9	Osmium 76 Os 190.23 2.2	Iridium 77 Ir 192.22 2.2	Platinum 78 Pt 195.08 2.2	Gold 79 Au 196.97 2.4	Mercury 80 Hg 200.59 1.9	Thallium 81 Tl 204.38 1.8	Lead 82 Pb 207.20 1.8	Bismuth 83 Bi 208.98 1.9	Polonium 84 Po (209) 2.0	Astatine 85 At (210) 2.2	Radon 86 Rn (222) 2.4					
Francium 87 Fr (223) 0.7	Radium 88 Ra (226) 0.9	89-102 **	Lanthanum 103 Lr (262)	Rutherfordium 104 Rf (261)	Dubnium 105 Db (262)	Seaborgium 106 Sg (263)	Bohrium 107 Bh (262)	Hassium 108 Hs (265)	Mtnerium 109 Mt (266)	Ununium 110 Uun (271)	Ununium 111 Uuu (272)	Ununium 112 Uub (277)	Ununium 113 Uut (284)	Ununium 114 Uuq (289)	Ununium 115 Uup (288)	Ununium 116 Uuh (291)		Ununium 118 Uuo (294)					
*lanthanides		Lanthanum 57 La 138.91 1.1	Cerium 58 Ce 140.12 1.1	Praseodymium 59 Pr 140.91 1.1	Neodymium 60 Nd 144.24 1.1	Promethium 61 Pm (145) 1.1	Samarium 62 Sm 150.36 1.2	Europium 63 Eu 151.97 1.1	Gadolinium 64 Gd 157.25 1.2	Terbium 65 Tb 158.93 1.1	Dysprosium 66 Dy 162.50 1.2	Holmium 67 Ho 164.93 1.2	Erbium 68 Er 167.26 1.2	Thulium 69 Tm 168.93 1.3	Ytterbium 70 Yb 173.04 1.1								
**actinides		Actinium 89 Ac (227) 1.1	Thorium 90 Th 232.04 1.3	Protactinium 91 Pa 231.04 1.5	Uranium 92 U 238.03 1.4	Neptunium 93 Np (237) 1.4	Plutonium 94 Pu (244) 1.3	Americium 95 Am (243) 1.3	Curium 96 Cm (247) 1.3	Berkelium 97 Bk (247) 1.3	Californium 98 Cf (251) 1.3	Einsteinium 99 Es (252) 1.3	Fermium 100 Fm (257) 1.3	Mendelevium 101 Md (258) 1.3	Nobelium 102 No (259) 1.3								

Tabel Puntgroepen



Karaktertabelle

Character table for C_{2v} point group

	E	$C_2(z)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	linear, rotations	quadratic
A_1	1	1	1	1	z	x^2, y^2, z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_1	1	-1	1	-1	x, R_y	xz
B_2	1	-1	-1	1	y, R_x	yz

Character table for C_{3v} point group

	E	$2C_3(z)$	$3\sigma_v$	linear, rotations	quadratic
A_1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2
A_2	1	1	-1	R_z	
E	2	-1	0	(x, y) (R_x, R_y)	(x^2-y^2, xy) (xz, yz)

Character table for D_{2h} point group

	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	linear, rotations	quadratic
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1		x^2, y^2, z^2
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	R_y	xz
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	R_x	yz
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	y	
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	x	

Character table for D_{3h} point group

	E	$2C_3$	$3C'_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$	linear, rotations	quadratic
A'_1	1	1	1	1	1	1		x^2+y^2, z^2
A'_2	1	1	-1	1	1	-1	R_z	
E'	2	-1	0	2	-1	0	(x, y)	(x^2-y^2, xy)
A''_1	1	1	1	-1	-1	-1		
A''_2	1	1	-1	-1	-1	1	z	
E''	2	-1	0	-2	1	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)

Opgave 1 (35 punten; veel voorkomende stoffen, naamgeving, electronegativiteit, standaard berekeningen, electronconfiguratie, oplosbaarheid, electrochemische reeks, Hund's regel)

a) (5 punten) Noem 5 van de 10 meest voorkomende gassen waaruit de atmosfeer bestaat (exclusief waterdamp).

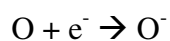
b) (5 punten) Vul onderstaande tabel in.

Chemische formule	Naam
NaH ₂ PO ₃	
	iodiet
	ijzer(III)permanganaat
SO ₃	
	waterstoffluoride

c) (5 punten) Wat betekenen alle symbolen in de vergelijking van Allred en Rochow?

$$\chi = 0,359 Z^* / r^2 + 0,744 \quad .$$

d) (5 punten) Wat is de effectieve kernlading, Z_{eff} , voor het expliciet genoemde elektron in de reactievergelijking voor de elektronaffiniteit van zuurstof? Maak gebruik van Slaterorbitalen.



e) (5 punten) Een student(e) drinkt een halve liter bier. Het ethanol in het bier (5% van het volume) wordt door een cascade van enzymatisch gekatalyseerde reacties omgezet tot CO₂. Hoeveel gram CO₂ ademt de student uit die oorspronkelijk als C₂H₅OH geconsumeerd was? Gebruik voor de berekening de dichtheid van zuivere ethanol, 0.79 g/cm³.

f) (5 punten) Vul onderstaande tabel in.

Atoom/ion	Verkorte electronconfiguratie
C	
Cl ⁻	
Pb	
Fe ²⁺	
Pd	

g) (5 punten) Omcirkel het juiste antwoord.

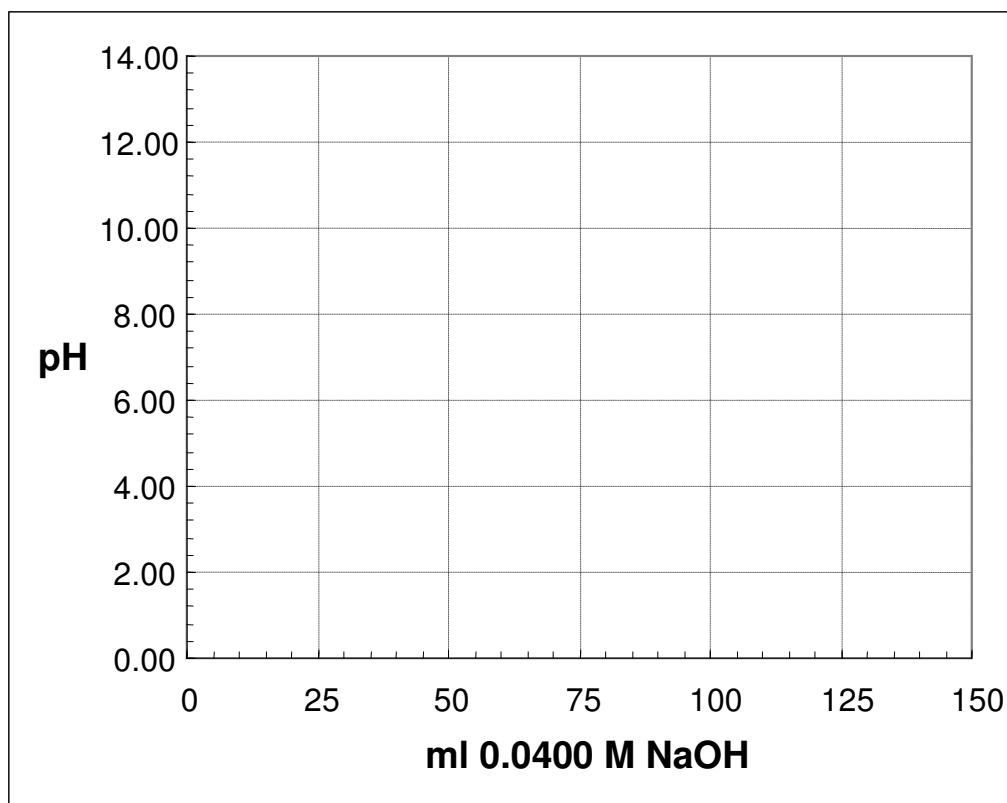
- a) Kwik(I)sulfaat, Hg₂SO₄, is slecht oplosbaar. waar / niet waar
- b) De oxidatietoestand in O₃ is voor alle O atomen gelijk. waar / niet waar
- c) De reactie $\text{Pt}^{2+}_{\text{aq}} + \text{H}_{2(\text{g})} \rightarrow \text{Pt} + 2\text{H}^{+}_{\text{aq}}$ verloopt spontaan. waar / niet waar
- d) De juiste electronegativiteitsvolgorde is O > N > Br > C. waar / niet waar
- e) Het MO diagram en de regel van Hund verklaren dat O₂ paramagnetisch is. waar / niet waar

Opgave 2 (35 punten; zuren en basen, titratie, Lewis structuren en resonantie, symmetrie en puntgroepen)

Methaanzuur, ook wel mierenzuur genoemd, heeft als molecuulformule HCOOH . Het heeft een pK_a van 3.75 en een molaire massa van 46.03 g/mol.

a) (4 punten) Bereken $[\text{HCOOH}]$, $[\text{HCOO}^-]$ en de pH voor een oplossing van 0.09205 g mierenzuur in 100 mL water.

b) (10 punten) Teken hieronder nauwkeurig de titratiecurve van een 100 mL 0.0200 M methaanzuur-oplossing met 0.0400 M NaOH. Bereken daartoe minimaal de pH *halverwege* equivalentie, bij equivalentie, en de pH na toevoeging van 100 en 150 mL NaOH oplossing. Laat op de volgende pagina jouw berekeningen zien.



Volume en pH *halverwege* equivalentie:

Volume en pH bij equivalentie:

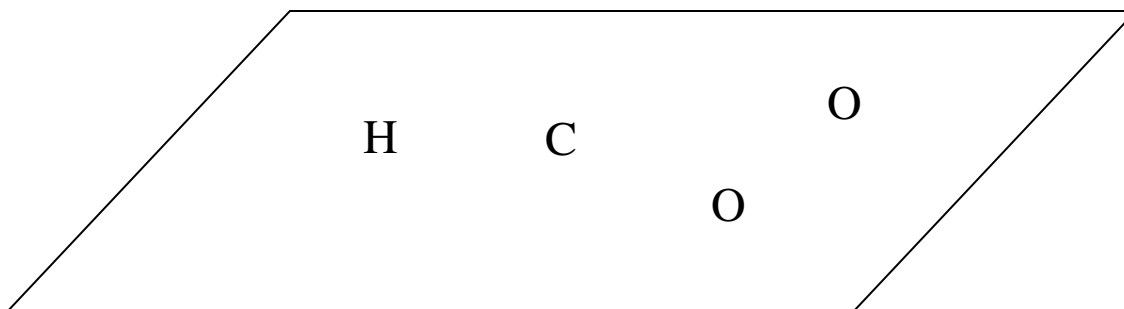
pH bij 100 mL NaOH

pH bij 150 mL NaOH

c) (4 punten) Teken de Lewis structuur van HCOOH en geef de hybridisatie aan op het koolstof- en de twee zuurstofatomen.

d) (4 punten) Teken de twee resonantiestructuren van het methanoaat-ion, HCOO^- .

e) (4 punten) Maak hieronder de 3-dimensional schets van het methanoaat-ion af. Geef duidelijk aan hoe alle covalente bindingen tot stand komen uit (gehybridiseerde) orbitalen. Benoem die atomaire orbitalen en geef aan welke bindingen van het type σ of π zijn.



f) (4 punten) Wat zijn de symmetrie elementen van het methanoaat-ion?

g) (2 punten) Tot welke puntgroep behoort het methanoaat-ion?

h) (3 punten) Verdeel het totale aantal vrijheidsgraden van het methanoaat ion onder in translaties, rotaties en vibraties. Hoeveel zijn er van ieder?

Opgave 3 (30 punten; moleculaire orbitaaldiagrammen, thermodynamica, evenwichtsconstante)

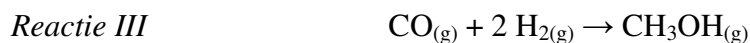
De productie van methanol start met de reactie van aardgas met water over een nikkelkatalysator bij hoge druk en hoge temperatuur:



Deels reageert het $\text{CO}(\text{g})$ door tot $\text{CO}_2(\text{g})$:



Het mengsel van hoofdzakelijk CO en H_2 (synthesegas) reageert over een koperkatalysator tot methanol:



- a) (4 punten) Teken het moleculaire orbitaal diagram voor CO en laat zien dat het een bindingsorde van 3 heeft. Ga ervan uit dat de ordening van σ en π moleculaire orbitalen dezelfde is als van O_2 .

b) (4 punten) Schat de reactieenergieën voor reacties I en II op basis van bindingsenergieën.

c) (4 punten) Bereken ΔH_r° uit de vormingsenthalpieën voor reacties I en II.

d) (4 punten) Geef commentaar op het verschil tussen jouw antwoorden in b en c. Zijn de reacties exotherm of endotherm onder standaard omstandigheden?

d) (4 punten) Bereken ΔS_r° voor reactie III.

e) (2 punten) Leg uit waarom de reactie III bij erg hoge druk wordt uitgevoerd.

f) (4 punten) Laat door berekening zien dat de fase van het CH_3OH en H_2O in reactie IV bepalend is of de reactie spontaan verloopt onder standaard omstandigheden.

g) (4 punten) Hoe groot is de evenwichtsconstante, K , voor reactie IV onder standaard omstandigheden?