

Antwoorden Anorganische Chemie (cursus Kwantum-Anorganisch)
27 juni 2017

Opgave 1 – Opbouw van atomen

a.

De elektronenconfiguratie van Cl is: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^5$

b.

De figuur laat zien dat de mate van penetratie van de 3s/3p/3d-orbitalen in de 1s-schil als volgt is: $3s > 3p > 3d$ wat betekent dat de afscherming van deze orbitalen van de kern door 1s als volgt is: $3s < 3p < 3d$ en dus dat de effectieve kernlading ondervonden door elektronen in de orbitalen zal zijn: $3s > 3p > 3d$ en dus de energieën van de orbitalen zullen zijn: $3s < 3p < 3d$. Het gevolg is dat de energie van de 3d-orbitalen van chloor te hoog is om gevuld te zijn.

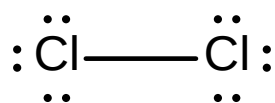
c.

Aantal knoopvlakken is altijd $(n-1)$; $n=3$ dus 2 knoopvlakken.

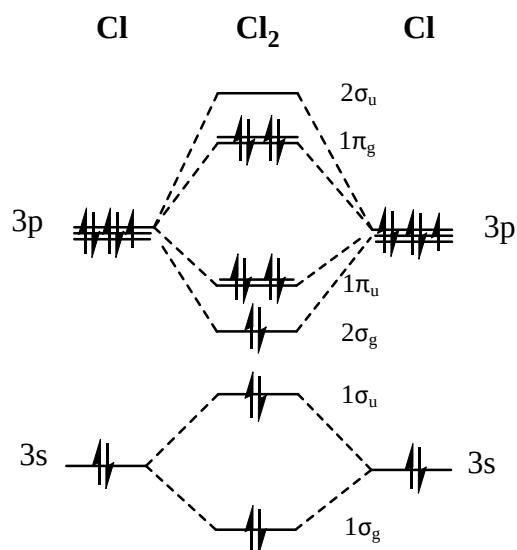
De 3p-orbitalen hebben 1 knoopvlak op de kern en dus is 1 radiaal knoopvlak.

Opgave 2 – Structuur van moleculen

a. Lewisstructuur van Cl_2 :



b. Het MO-diagram van Cl_2 :



NB: Het aangeven van de symmetrie van de orbitalen was niet expliciet gevraagd dus was niet nodig voor een correct antwoord.

c.

Berekening vanuit het MO-diagram:

$b = \frac{1}{2}$ (aantal bindende elektronen – aantal antibindende elektronen)

$b = \frac{1}{2} (8-6)$

$b = 1$

Vergelijking van MO-diagram en Lewisstructuur: beide modellen geven dezelfde 'bond order' van 1.

Opgave 3 – Structuur van vaste stoffen

a.

De bolstapeling is hcp (hexagonal close packed). De volgorde van de stapeling van As is: ABABAB....

b.

De Ni-atomen zitten in de octaëderholtes van As-atomen.

c.

As: $12 \cdot \frac{1}{6}$ (bovenvlak+ondervlak op de hoekpunten) $+ 2 \cdot \frac{1}{2}$
(bovenvlak+ondervlak in het midden) $+ 3 \cdot 1$ (binnenin) = 6;

Ni: 6

Verhouding Ni:As = 1:1, net als de samenstelling NiAs

d.

Bij een ionogene verbinding zullen de kationen op de Ni-posities zitten. De kationen zitten dicht bij andere kationen en stoten elkaar sterk af. Dit maakt de NiAs-structuur energetisch minder gunstig voor een ionogene verbinding.

Voor ionogene verbindingen is de keukenzoutstructuur of cesiumchloridestructuur energetisch gunstiger.

Opgave 4 – Zuren en basen

a.

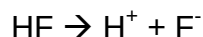
HCl is een sterk zuur ($pK_a < 0$) en dissocieert dus volledig in een waterige oplossing. De maximale concentratie H^+ is al aanwezig in de oplossing en deze zal niet verder worden beïnvloed door het afvangen van Cl^- d.m.v. BF_3 . De pH blijft dus hetzelfde.

b.

HF is een zwak zuur ($pK_a > 0$) en de dissociatie van HF in F^- en H^+ is onvolledig en afhankelijk van het evenwicht. F^- (Lewis base) uit de oplossing reageert met BF_3 (Lewis zuur) tot BF_4^- , waardoor $[F^-]$ afneemt. Het gevolg is dat de evenwichtsreactie een aflopende reactie wordt en $[H^+]$ dus toeneemt, indien voldoende BF_3 wordt toegevoegd. De pH zal dus dalen.

c.

De minimale pH wordt verkregen indien HF volledig gedissocieerd is volgens:



In dat geval:

$$[\text{H}^+] = 0.1 \text{ mol L}^{-1}$$

$$\text{pH} = -\log([\text{H}^+]) = -\log(0.1) = +1$$

Opgave 5 – Waterstof

a.

- Ionogeen: Voorbeelden zijn LiH, NaH, MgH_2 etc. Ionogene verbindingen waarin de electrostatistische interacties van H^- en bv Mg^{2+} domineren.
- Metallisch: Voorbeelden zijn PdH_x , ZrH_x , NiH_x etc. Waterstof moleculen zitten vaak op interstitiële sites wat veroorzaakt dat het metaal meer bros wordt; de stoichiometrie is variabel.
- Moleculair: Voorbeelden zijn CH_4 , NH_3 , H_2O . Covalente of polaire bindingen in moleculen.

b.

$\text{K} < \text{H}$, $\text{Sc} < \text{H}$, $\text{Ge} \cong \text{H}$ en $\text{Br} > \text{H}$

c.

Omdat watermoleculen via de dipolen in de moleculen onderling waterstofbruggen kunnen vormen, is water vloeibaar bij kamertemperatuur. Zonder deze waterstoffenbruggen zou water gasvormig zijn bij kamertemperatuur, wat zou betekenen dat er geen vloeibaar water zou zijn op aarde wat het leven zoals wij het kennen onmogelijk zou maken.