

Grundlæggende nanokemi

Eksamensbesvarelse

Thomas Just Sørensen 2023

Navn og/eller eksamensnummer

Thomas Just Sørensen

Opgave 1

a) klokkeslæt: 11:44

b)

$$K_{sp} = [M^{2+}][S^{2-}] = x^2$$

$$K_{sp} = [Bi^{3+}]^2[S^{2-}]^3 = (2x)^2(3x)^3 \Leftrightarrow x = 7,00373 \times 10^{-21} \text{ M (Wolfram alfa)}$$

$$K_{sp} = [Ag^+]^2[S^{2-}] = (2x)^2x \Leftrightarrow x = 2,55734 \times 10^{-17} \text{ M (Wolfram alfa)}$$

K(SP)	stof	M [g/mol]	s [M]	method	s [g/100 ml]	K [M ⁻¹]
1,82E-99	Bi ₂ S ₃	514,16	7,00E-21	solved	3,6E-19	-
1,40E-29	CdS	144,46	3,74E-15	simple math	5,4E-14	7,14E+09
1,27E-36	CuS	95,611	1,13E-18	simple math	1,1E-17	7,87E+16
9,04E-29	PbS	239,3	9,51E-15	simple math	2,3E-13	1,11E+09
4,65E-14	MnS	87,003	2,16E-07	simple math	1,9E-06	2,15E-06
1,07E-21	NiS	90,753	3,27E-11	simple math	3,0E-10	9,35E+01
2,03E-58	PdS	138,49	1,42E-29	simple math	2,0E-28	4,93E+38
9,91E-74	PtS	227,14	3,15E-37	simple math	7,2E-36	1,01E+54
6,69E-50	Ag ₂ S	247,8	2,56E-17	solved	6,3E-16	-
3,25E-28	SnS	150,76	1,80E-14	simple math	2,7E-13	3,08E+08

c) Dette gøres ikke for Bi₂S₃ og Ag₂S.

$$HS^- = H^+ + S^{2-} ; K_A = 1e-19 \text{ M} = [S][H^+]/[HS^-]$$

$$M^{2+} + S^{2-} = MS ; 1/K_{sp} = 1/[S][M]$$

$$HS^- + M^{2+} = MS + H^+ ; K = [H^+]/[HS^-][M^{2+}] = K_A/K_{sp}$$

Udregnede værdier vist ovenfor.

Opgave 1, fortsat

...

d) $\Delta G = -RT\ln(K)$, hvilket bliver for processerne:

K(SP)	stof	K	ΔG (SP) [kJ/mol]	ΔG fra K [kJ/mol]	$c(M^{2+})$ [M]	$m(M^{2+})$ [g]
1,82E-99	Bi ₂ S ₃	-	563			
1,40E-29	CdS	7,14E+09	165	-56,2	6,19E-20	8,95E-20
1,27E-36	CuS	7,87E+16	205	-96,4	5,62E-27	5,37E-27
9,04E-29	PbS	1,11E+09	160	-51,6	4,00E-19	9,57E-19
4,65E-14	MnS	2,15E-06	76	32,3	2,06E-04	1,79E-04
1,07E-21	NiS	93,45794	120	-11,2	4,73E-12	4,30E-12
2,03E-58	PdS	4,93E+38	329	-220,7	8,98E-49	1,24E-48
9,91E-74	PtS	1,01E+54	416	-308,1	4,38E-64	9,96E-64
6,69E-50	Ag ₂ S	-	281			
3,25E-28	SnS	3,08E+08	157	-48	1,44E-18	2,17E-18

e)

$K = [H^+]/([HS^-][M^{2+}])$ hvor vi har kender $[HS^-] = 0,90$ M og hvor pH er 10,4 (Google)

$[M^{2+}] = [H^+]/([HS^-]K) = (10^{-10,4})/(0,90 \cdot K)$, vi skal huske at gange med 10, da vi jo fortynder 10 ml til 100 mL.

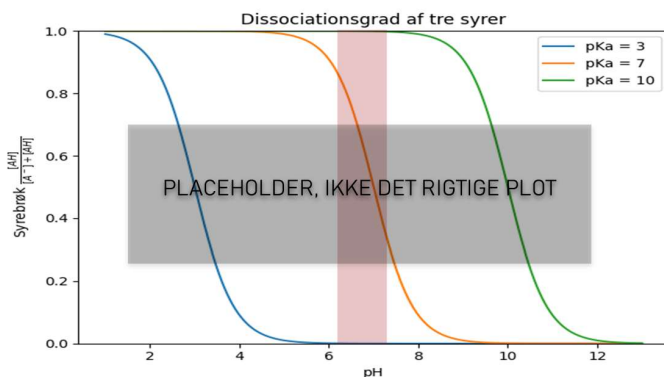
Se tabel for resultat. Bemærk at alle tungmetaller kan fjernes med sulfide, mens mangan og nikkel ikke fælder fuldstændigt.

g) klokkeslæt: 12:04

Opgave 2

a) klokkeslæt: 10:17

b) Fosforsyre har for høj pKa, og TRIS har en pKa der ligger mere end 1 enhed ved siden af buffer punktet og er derfor ikke god.



c)

Jeg har valgt kun at plotte de tre mest relevante ligevægte fordi det blev uoverskueligt med 10 linjer.

d) Vi bruger borsyre med første pKa = 9.3 (CHES og natron kan også fint bruges)

Molvægt: $M(\text{H}_2\text{SO}_4) = 61,83 \text{ g/mol}$ (google)

$$\text{pH} = \text{pK}_A + \log\left[\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}\right]$$

$$9,3 = 9,14 + \log\left[\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}\right]$$

$$[\text{A}^-]/[\text{HA}] = 10^{9,3 - 9,14} = 10^{0,16} = 1,45$$

Det giver mening, vi er over pKa.

Vi skal bruge 0,050 M borsyre i bufferen, og bemærker at vi skal pille en protoner af borsyren.

0,050 M borsyre, $0,050 \cdot 1,45 \text{ M}$ borsyres korresponderende base, i alt $0,05 \cdot 2,45 \text{ M} = 0,123 \text{ M}$

Vi laver 1 L, så vi skal bruge 0,123 mol borsyre.

Vi skal indstille med 0,073 mol base for at få rette mængde borsyre, altså $0,073 \text{ mol} = 73 \text{ mL } 1 \text{ M NaOH}$.

Opskrift:

73 ml 1M NaOH afmåles og overføres til en 1,000 L volumetrisk flaske.

$0,123 \text{ mol} \cdot 61,83 \text{ g/mol} = 7,57 \text{ g}$ borsyre afvejes i et bægerglas og tilsættes LANGSOMT til den volumetriske flaske. Bægerglasset vaskes med 2 gange 50 mL vand, der overføres til den volumetriske flaske.

Når væsken har nået stuetemperatur, fyldes der til 1,000 L med vand.

e) klokkeslæt: 10:41

Opgave 3

a) klokkeslæt: 10:43

b) 2butadiene(g) = 4-vinyl-1-cyclohexene(g)

$$\Delta H = 1 \cdot 69,5 - (2 \cdot 110) = -150,5 \text{ kJ/mol}$$

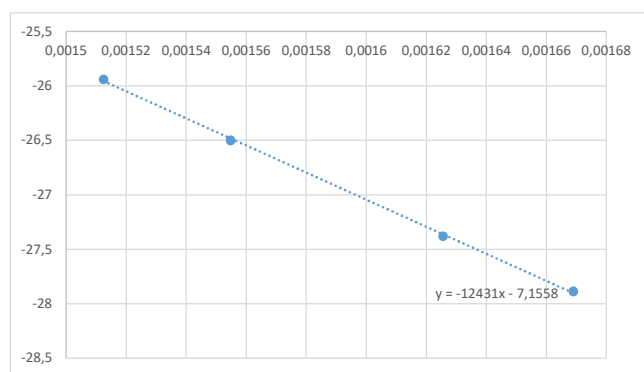
$$\Delta S = 1 \cdot 310,45 - (2 \cdot 199) = -87,55 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$$

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S = -150,5 - T \cdot (-87,55) \text{ kJ/mol}$$

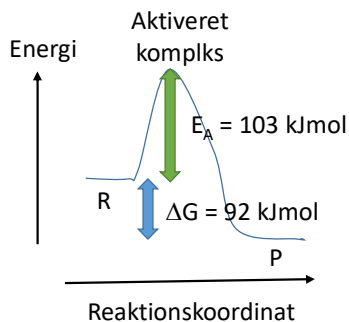
c)

T [°C]	326	342	370	388	
105 k [torr·1·min ⁻¹]		2.5	4.15	10	17.5
k (torr·1min ⁻¹)	0.000025	0.0000415	0.0001	0.000175	
1/(M min)	4.65E-11	7.72E-11	1.86E-10	3.25E-10	
1/(M ·s)	7.75E-13	1.29E-12	3.10E-12	5.42E-12	

d) Arrhenius plot: $\ln k = A - E_A/R \cdot 1/T$



E_A kommer fra hældningen som er $-E_A/R \rightarrow E_A = -(-12431 \cdot 8,3145) = 103 \text{ kJ/mol}$



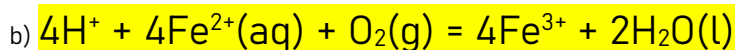
e)

f) ΔG ved 326 celsius er -98 kJ/mol, mens ΔG ved 388 grader er -92,6 kJ/mol. Det er en betydelig variation, med en gennemsnitlig usikkerhed på ΔG på 2 kJ/mol.

g) klokkeslæt: 11:21

Opgave 4

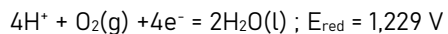
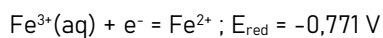
a) klokkeslæt: 11:21



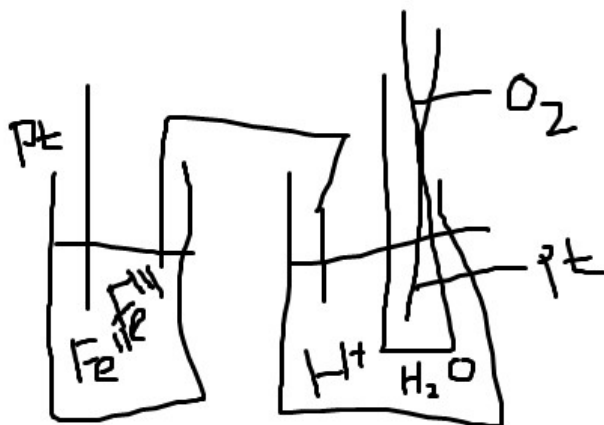
c)

$$K = [\text{H}_2\text{O}]^2 [\text{Fe}(\text{III})]^4 / [\text{Fe}(\text{II})]^4 p(\text{O}_2) [\text{H}^+]^4$$

d)



$$E = E_{\text{red}} + E_{\text{ox}} = E_{\text{red}} - E'_{\text{red}} = 1,229 - (-0,771) \text{ V} = 2,000 \text{ V}$$



e)

f)

$$E = E_{\text{red}} - RT/nF \ln([\text{H}_2\text{O}]^2 [\text{Fe}(\text{III})]^4 / [\text{Fe}(\text{II})]^4 p(\text{O}_2) [\text{H}^+]^4) = 2,000 - 8,31451 \cdot 298 / (4 \cdot 96485) \cdot \ln([0,05]^4 / [0,02]^4 \cdot 0,2 \cdot [0,1]^4) \text{ V} = 1,90 \text{ V}$$

g)

$$\Delta G = -nFE = -4 \cdot 96485 \cdot 2,00 = -772 \text{ kJ/mol}$$

$$E = E_{\text{red}} - RT/nF \ln([\text{H}_2\text{O}]^2 [\text{Fe}(\text{III})]^4 / [\text{Fe}(\text{II})]^4 p(\text{O}_2) [\text{H}^+]^4) = 2,000 - 8,31451 \cdot 298 / (4 \cdot 96485) \cdot \ln([0,1]^4 / [0,1]^4 \cdot 1 \cdot [10^{-7}]^4) \text{ V} = 1,58 \text{ V}$$

$$\Delta G(\text{pH}=7) = -nFE = -4 \cdot 96485 \cdot 1,58 = -612 \text{ kJ/mol}$$

h) Begge ΔG er MEGET store, derfor vil Jern være oxideret til Jern(III) på jordens overflade

i) klokkeslæt: 11:42