

Zadania kwalifikacyjne - magia estrów

Jan Nasieniewski

April 2025

Zadanie 1.

Opisz model atomu wodoropodobnego Bohra i pokaż, że energie elektronu są w nim skwantowane¹

Zadanie 2.

Wprowadzenie

Funkcja falowa ψ to funkcja przypisująca każdemu punktowi rozważanej przestrzeni określoną wartość zespoloną². Kwadrat modułu tej funkcji to gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki (w naszym przypadku elektronu) w danym punkcie:

$$\rho(\vec{r}) = |\psi^2(\vec{r})| \quad (1)$$

My będziemy rozważać układy wieloelektronowe, a więc dla n elektronów mamy: $\psi : \mathbb{R}^{3n} \rightarrow \mathbb{C}$. Zakładamy, że ψ można przedstawić jako iloczyn tzw. orbitali - funkcji falowych dla jednej pary elektronowej (czyli dwóch elektronów różniących się jedynie spinem³):

$$\psi = \prod_{k=0}^n \phi_k \quad (2)$$

Dla takich układów gęstość prawdopodobieństwa interpretuje się jako prawdopodobieństwo, że znajdziemy cząstkę 1. w pozycji $\vec{r}_1$, cząstkę 2. w pozycji $\vec{r}_2$, itd.:

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots)|^2 = \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots)$$

¹Podpowiedź: [REDACTED]

²przykładowo dla pojedynczej cząstki w trzech wymiarach mamy: $\psi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$

³formalnie stwierdzilibyśmy, że różnią się one jedynie magnetyczną spinową liczbą kwantową

Liczenie prawdopodobieństwa w akcji

Poniżej podano funkcję falową orbitalu $2p_z$ atomu wodoru:

$$\psi(r, \phi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta$$

gdzie $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ to promień atomu Bohra, θ to odległość (kąt) zenitalna(y), a ϕ to odległość (kąt) azymutalna(y); r to odległość wybranego punktu przestrzeni od środka układu współrzędnych. Oblicz prawdopodobieństwo, że elektron znajdzie się pomiędzy sferami o promieniach $r_1 = a_0$ i $r_2 = 2a_0$.

Podpowiedź 1.:

Podpowiedź 2.:

Podpowiedź 3.:

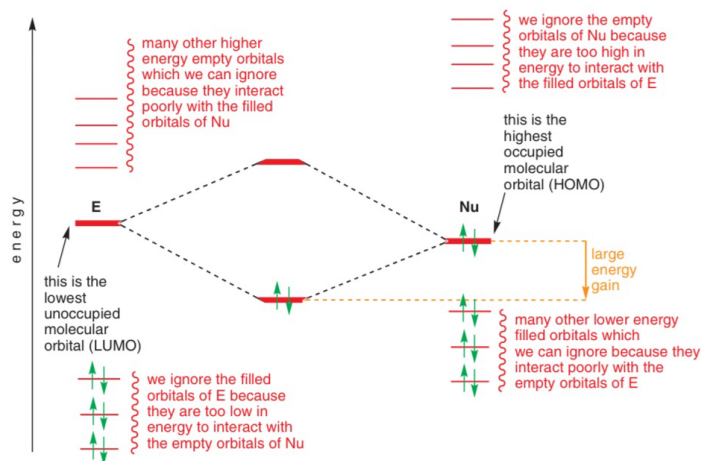
Zadanie 3

Teoria reaktywności(Rysunek 1)

- Elektrofile to ubogie w elektrony walencyjne indywidua chemiczne, nazywane czasami kwasami Lewisa, ze względu na niedobór elektronów ⁴. Elektrofilami mogą być cząsteczki elektroobjętne, np. $AlCl_3$, kwasy protonowe, np. HCl , HBr albo dodatnio naładowane jony, np. NO_2^+ , Cl^+ . Jeśli ładunkiem dodatnim jest obarczony atom węgla, to cały układ nazywamy karbokationem.
- Nukleofile to indywidua chemiczne obdarzone (cząstkowym) ładunkiem ujemnym. Nukleofilem może być anion, np. OH^- lub elektroobjętne cząsteczka, zawierająca wolną parę elektronową, np. H_2O , NH_3 . Aby zaszła jakakolwiek reakcja cząsteczki reagujące ze sobą muszą mieć orbitale o odpowiednich poziomach energetycznych - zapełniony orbital nukleofila i pusty orbital elektrofila. Z reguły puste orbitale są wysokoenergetyczne, a zapełnione - niskoenergetyczne. Najlepiej oddziałują ze sobą HOMO (highest occupied molecular orbital) nukleofila i LUMO (lowest unoccupied molecular orbital) elektrofila, ponieważ różnica energii pomiędzy tymi orbitalami jest najmniejsza.

Najbardziej klasyczne reakcje w chemii organicznej to reakcje nukleofil - elektrofili

⁴Elektrony walencyjne to najbardziej energetyczne i najbardziej reaktywne elektrony w danej cząsteczce



(a) Wykres energetyczny orbitali⁵ od ich energii. Po lewej elektrofili, po prawej nukleofil

- Nukleofile:
- oddają elektrony,
 - mają wysokoenergetyczne HOMO.

Energję HOMO nukleofila podnosi obecność w jego strukturze:

- ładunku ujemnego,
- wolnych par elektronowych,
- wiązań podwójnych C=C,
- wiązań σ do elektrododatniego atomu.

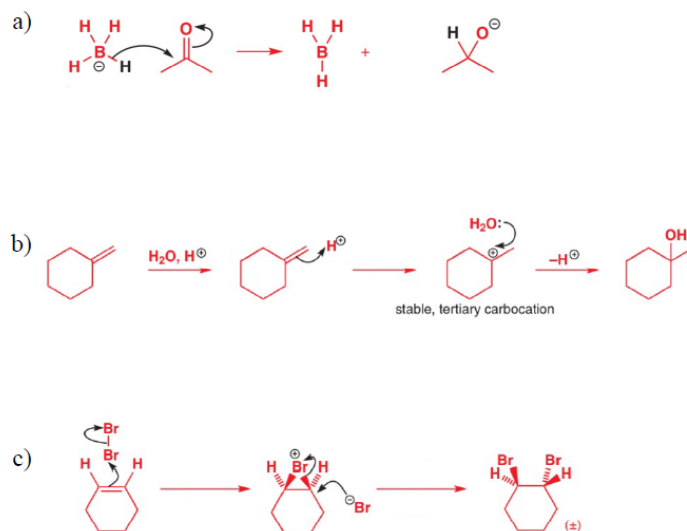
- Elektrofile:
- przyjmują elektrony,
 - mają niskoenergetyczne LUMO.

Energję LUMO elektrofila obniża obecność w jego strukturze:

- ładunku dodatniego,
- pustych orbitali p,
- wiązań podwójnych i pojedynczych do elektroujemnego atomu.

(b) cechy nukleofili i elektrofili

Rysunek 1: Właściwości nukleofili i elektrofili



Rysunek 2: Rozróżnianie elektrofilu od nukleofilu

Rozróżnianie elektrofilu od nukleofilu

Powyżej (Rysunek 2) zamieszczono trzy mechanizmy reakcji. Dla każdej z podanych reakcji wskaż elektrofil i nukleofil. Strzałki oznaczają ruch elektronów; tutaj znajdziesz wytłumaczenie wzorów szkieletowych

Zadanie 4.

Wytłumaczenie notacji

Alkohole (rysunek 3a) to związki organiczne zawierające jedną lub więcej grup -OH (grup hydroksylowych) połączonych z atomem węgla.

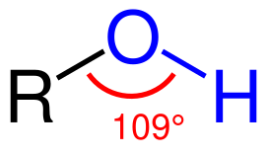
Kwasy karboksylowe (rysunek 3b) to grupa organicznych związków chemicznych zawierająca grupę -COOH (grupę karboksylową).

-R to uogólniony zapis na resztę alkilową (np. $-CH_3$, $-CH_2-CH_2-CH_3$)

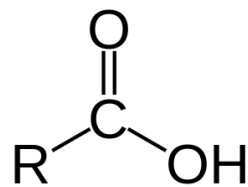
Estry

Ester (rysunek 3c) powstaje m.in. jako produkt tzw. reakcji estryfikacji Fischera (rysunek 3d). Jest to reakcja pomiędzy kwasem karboksylowym i alkoholem. Jest ona katalizowana kwasem mineralnym (nieorganicznym) - np. H_2SO_4 . Warunki kwasowe potrzebne do katalizy często oznacza się jako ' H^+ '.

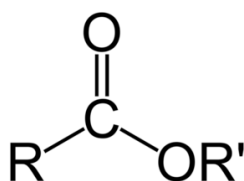
Rozwiąż zadane poniżej problemy (rysunek 4). W problemie c produkt reakcji został podany w ramce. Wskaż odpowiedni substrat



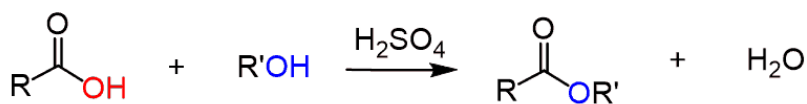
(a) Ogólny wzór alkoholu



(b) Ogólny wzór kwasu karboksylowego



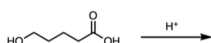
(c) Ogólny wzór estru



(d) Schemat reakcji estryfikacji

Rysunek 3: Wzory i schematy

Draw the product of the following reaction:

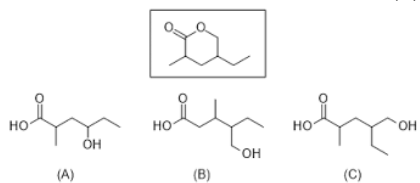


(a) Problem a

Show starting materials and reaction conditions for how the ester below could be constructed using a Fischer esterification reaction.



(b) Problem b

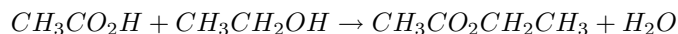


(c) Problem c

Rysunek 4: Zadanie 4.

Zadanie 5

Mój stary to fanatyk estrów. Pomóż mu proszę zsyntezować w piwnicy octan etylu. Przebieg reakcji:



- Chce on otrzymać 200g produktu.
- Wydajność reakcji wynosi 30%.
- Jest on również koneserem denaturatu, w którym to stężenie alkoholu wynosi 96% objętościowych. Gęstość czystego alkoholu to $789 \frac{kg}{m^3}$. Objętość jednej butelki to pół litra.
- Jako źródła kwasu octowego używa octu o stężeniu 20% objętościowych. Gęstość czystego kwasu octowego wynosi $1,05 \frac{g}{cm^3}$. Objętość jednej butelki to pół litra.
- Załóż, że katalizatorem jest kwas siarkowy, który ukradł Czeczenom. Ma on go nieograniczoną ilość.
- Aby reakcja zaszła z rozsądną wydajnością potrzebny jest 50% nadmiar kwasu octowego i 70% nadmiar alkoholu.

Oblicz ile minimalnie musi on kupić butelek odpowiednio kwasu octowego i alkoholu etylowego.

Zadanie Dodatkowe

Wyprowadź wzór na energie elektronu w przybliżeniu klasycznym ale z uwzględnieniem efektów relatywistycznych, wiedząc, że zachodzi:

- Warunek kwantyzacji: $\oint L d\phi = n_\phi h$ i $\oint p_r dr = n_r h$
- Relacja pęd-energia: $E^2 = (pc)^2 + (m_0 c^2)^2$
- siła oddziaływania jądro-elektron jest centralna (co z tego wynika?)

Rozwiązanie

UWAGA! Zadanie 1. i 2. mają na celu być wprowadzeniem/racjonalizacją późniejszych konceptów. Ich treść nie znajdzie odzwierciedlenia w warsztatach. Warsztaty będą się skupiały na pracy doświadczalnej. Teoria będzie jedynie uzupełnieniem.

Treść odpowiedzi widać zaznaczając myszką i wklejając w przeglądarkę.

W razie problemów/uwag pisać na adres janmareknas@gmail.com