Zadania kwalifikacyjne - magia estrów

Jan Nasieniewski

April 2025

Zadanie 1.

Opisz model atomu wodoropodobnego Bohra i pokaż, że energie elektronu są w nim skwantowane[1]

Zadanie 2.

Wprowadzenie

Funkcja falowa ψ to funkcja przypisująca każdemu punktowi rozważanej przestrzeni określoną wartość zespoloną [2]. Kwadrat modułu tej funkcji to gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki (w naszym przypadku elektronu) w danym punkcie:

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

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

$$\psi = \prod_{k=1}^{n} \phi_k \tag{2}$$

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.:

$$|\psi(\vec{r_1}, \vec{r_2}...)|^2 = \rho(\vec{r_1}, \vec{r_2}...)$$

[1] Podpowiedź: [redacted]

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

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

Liczenie prawdopodobieństwa w akcji

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

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

gdzie $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ 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.:

[redacted]

Podpowiedź 2.:

[redacted]

Podpowiedź 3.:

[redacted]

Zadanie 3

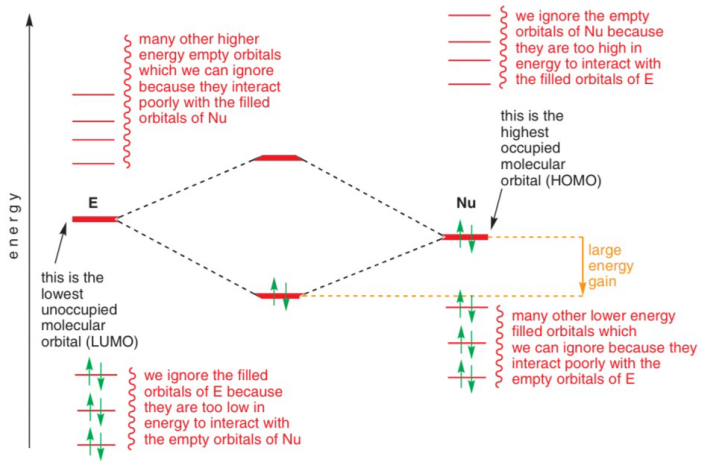
Teoria reaktywności(Rysunek 1)

- 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 elektroobojętna 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 oddziaływują 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 - elektrofil

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



(a) Wykres energetyczny orbitali[5] od ich energii. Po lewej elektrofil, po prawej nukleofil

Nukleofile:
- oddają elektrony,
- mają wysokoenergetyczne HOMO.

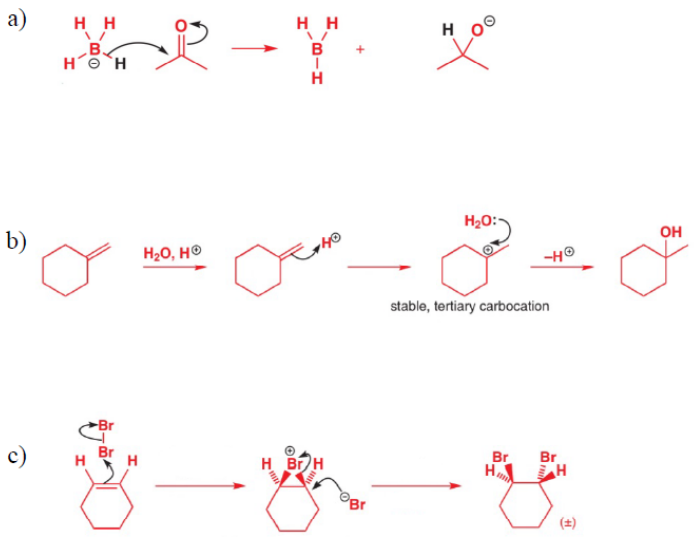
Energię HOMO nukleofila podnosi obecność w jego strukturze:
- ładunku ujemnego,
- wolnych par elektronowych,
- wiązań podwójnych C=C,
- wiązań σ do elektrododatniego atomu.

Elektrofile:
- przyjmują elektrony,
- mają niskoenergetyczne LUMO.

Energię 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 elektrofili od nukleofili

Rozróżnianie elektrofili od nukleofili

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.

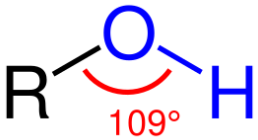
Kwasy karboksylowe (rysunek 3b) to grupa organicznych związków chemicznych zawierająca grupę -COOH (grupę karboksylową).

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

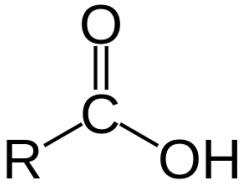
Estry

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^+'.

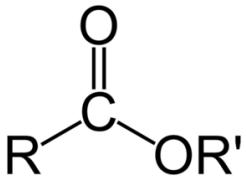
Rozwiąż zadane poniżej problemy (rysunek 4). W problemie c produkt reakcji został podany w ramce. Wskaż odpowiedni substrat



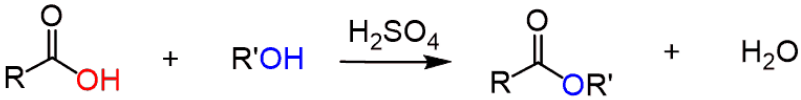
(a) Ogólny wzór alkoholu



(b) Ogólny wzór kwasu karboksylowego

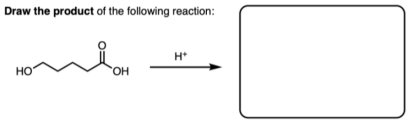


(c) Ogólny wzór estru

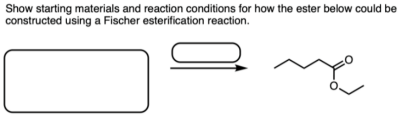


(d) Schemat reakcji estryfikacji

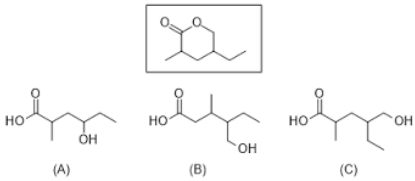
Rysunek 3: Wzory i schematy



(a) Problem a



(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:

$$CH_3CO_2H + CH_3CH_2OH \rightarrow CH_3CO_2CH_2CH_3 + H_2O$$

- 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 źródla 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 semi-klasycznym ale z uwzględnieniem efektów relatywistycznych, wiedząc, że zachodzi:

- Reguła kwantyzacji Bohra-Sommerfelda: $\oint L d\phi = n_\phi h$ i $\oint p_r dr = n_r h$
- Relacja pęd-energia: $E^2 = (pc)^2 + (m_0c^2)^2$
- 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 podpowiedzi widać zaznaczając myszką i wklejając w przeglądarkę.

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