

Farmaziako Gradua

2014/01/07

Kimika Orokorra eta Ez-organikoa _____ 31 Taldea

1. Ondoko ekuazioetako baten bat al da hidrogeno atomoaren Schrödinger-en ekuazioa? Azaldu laburki zure erantzuna

a)

$$E_R = -K \frac{N_A A |Z_1||Z_2| e^2}{r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

b)

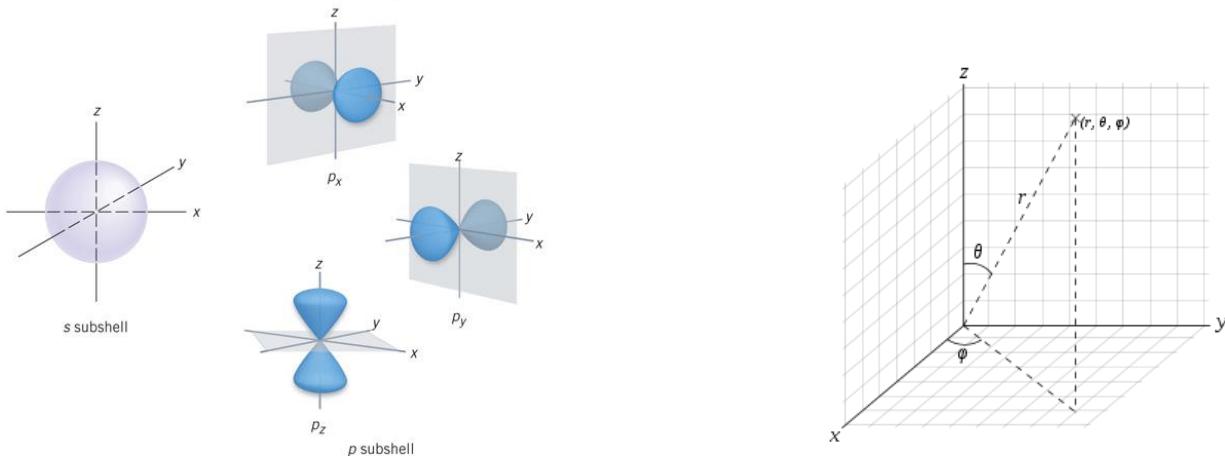
$$\left[-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] \psi = E \psi$$

- a) Born-Haber ekuazioa da, solido ionikoen sare-energia kalkulatzeko
- b) Hiru-dimentsioko kutxa batean dagoen partikula baten Schrödinger-en ekuazioa da (energia zinetikoa baino ez dauka)

Beraz, ez a ez b da hidrogeno atomoaren Schrödinger-en ekuazioa

2. Ondokoak s, p_x, p_y eta p_z orbitaletako funtzio angeluarra dira hidrogeno atomoan.

$$s: \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \quad p_x: \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \cos\phi \quad p_y: \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin\theta \sin\phi \quad p_z: \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos\theta$$



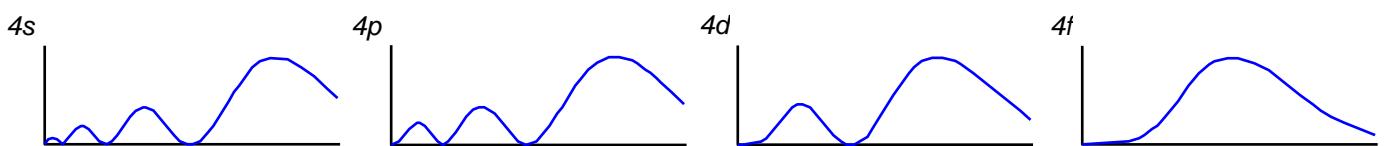
Ikusi bezala, s funtzioak ez dauka θ y ϕ angeluekin harremanean dagoen terminorik. Azaldu laburki.

s funtzioa esferikoa da, horregatik ez dauka θ y ϕ angeluekiko harremanik

Ikusi bezala, p_z funtzioak ez dauka ϕ angeluarekin harremanean dagoen terminorik. Azaldu laburki

p_z funtzioan, xy planoa nodo-planoa da; hau da, funtzioak zero balioa hartzen du xy planoan ϕ angeluaren eragina ez dagoelako

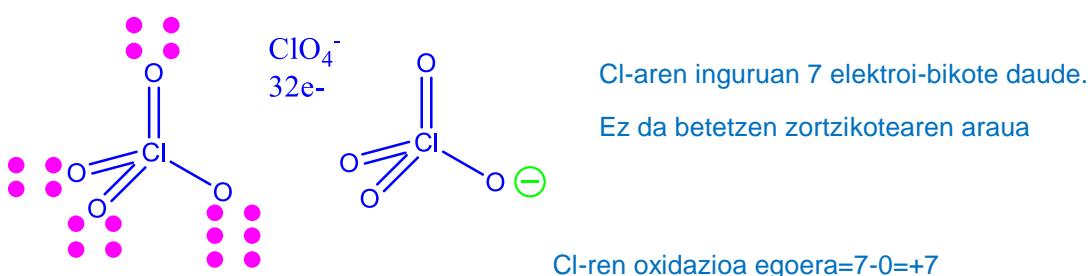
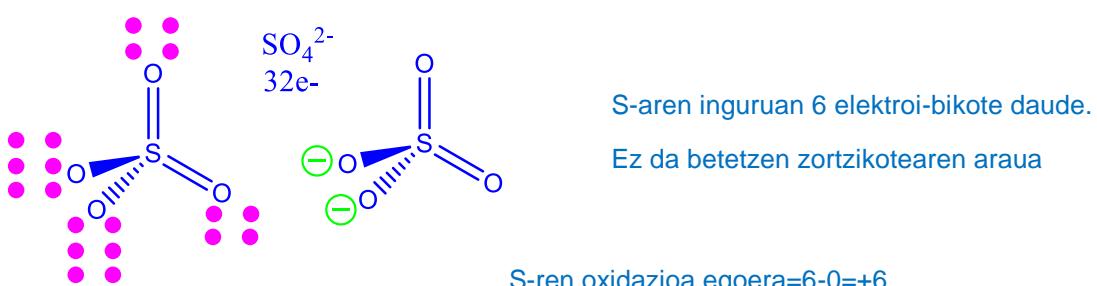
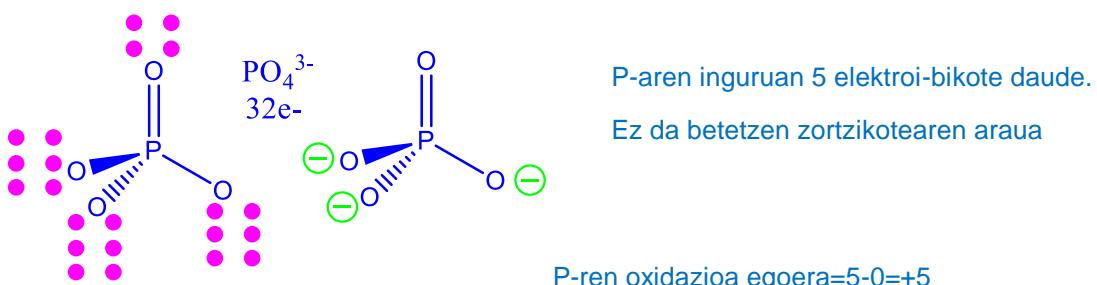
3. Ondoko grafikoetan banaketa erradialaren funtziok daude irudikatuta r -ren aurrean (r =nukleora dagoen distantzia) $4s$, $4p$, $4d$ y $4f$ orbitaletarako hidrogeno atomoan. Zer nolako informazioa lortzen da grafiko horietatik? Azaldu laburki.



x ardatzeko parametroa r da; alegia, elektroiaren eta nukleoaren arteko distantzia.

Grafiko hautetatik ateratzen den informazio nagusia ondokoa da: orbital bakoitzean dagoen elektroiak duen probabilitatea r distantzia batera egoteko. Iku daitekeenez, batez bestean hurbilen egoteko probabilitate handiena $4f$ elektroiak dauka. Hala ere, une jakin batean s orbitalak dauka nukleotik hurbil egoteko probabilitate handiena.

4. Fosfato, sulfato eta perklorato ioien geometria determinatu. Anioi bakoitzean atomo zentralaren oxidazio-egoera determinatu. Zortzikotearen araua betetzen al da anioi hauetan? Azaldu laburki.



P, S eta Cl 3.periodoko elementuak dira, orduan zortzikotearen araua ez da zertan bete behar

5. Ondorengo orbital molekularren diagrama zeri dagokio, O₂ edo CO molekulari? Azaldu laburki

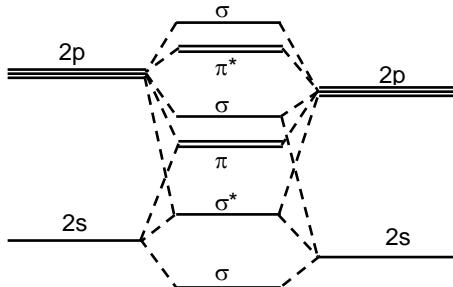


Diagrama ez da simetrikoa; beraz, CO da

Molekularen konfigurazio elektronikoa idatzi, eta lotura-ordena kalkulatu

CO (4+6)=10 elektroi: $1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^4 3\sigma^2$; lotura-ordena: $(8-2)/2=3$

Molekularen portaera magnetikoa azaldu

Diamagnetikoa, ez dauka parekatu gabeko elektroirik

6. Nolakoa da 14. taldeko solidoen portaera elektrikoa (eroankortasuna)? Azaldu laburki.

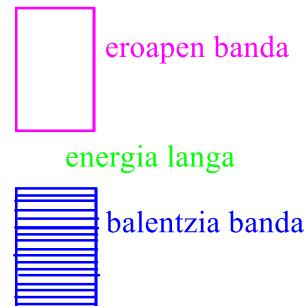
C, Si, Ge, Sn, Pb

Balentzia banda betea da, eta eroopen bandaren artean langa bat dago.

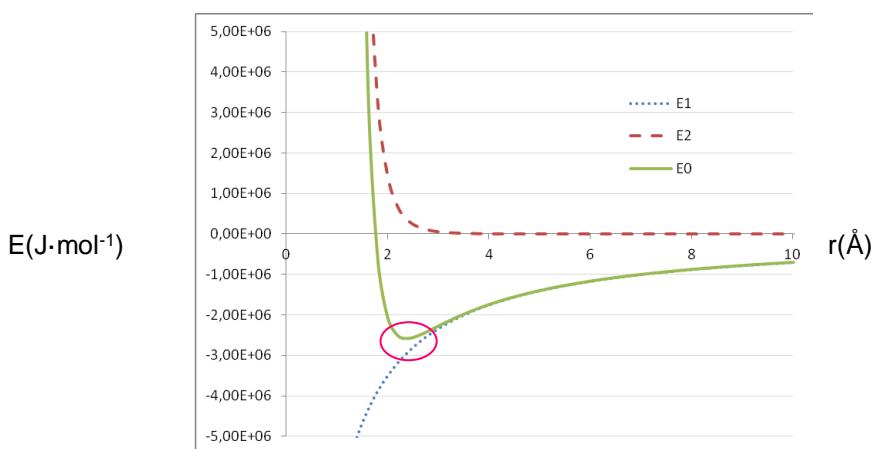
C, diamantean, langa altua, isolatzialea (solido kobalentea)

Si eta Ge, langa ertaina, erdieroaleak

Sn eta Pb, langa txikia, eroaleak (solido metalikoa)



7. Ondorengo grafikoan E0 dago irudikatuta r-ren aurrean CaF₂ solido ionikoan (E0=energia potentziala, eta r=kontrako zeinua duten ioien arteko distantzia).



¿Zer dira E1 eta E2?

E1, ioien artean dauden erakarpen eta aldarapen guztiei esker dagoen potentziala. Honek $-\infty$ -rantz jotzen du, r distantziak 0-rantz jotzen duenean

E2, geruza elektronikoen artean dauden aldarapenei esker dagoen potentziala. Honek $+\infty$ -rantz jotzen du, r distantziak 0-rantz jotzen duenean

Grafikoa erabiliz, determinatu, gutxi gora behera, sare-energia eta lotura-distantzia CaF_2 solido ionikoan

$$r_0=2,2 \text{ \AA}$$

$$E_s=-2,5 \cdot 10^6 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}=2500 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

Born-Haber-en ziklo bat diseinatu, CaF_2 solidoaren sare-energia kalkulatzeko.

$$\Delta H_f=\text{CaF}_2(\text{s})\text{-aren formazio-entalpia}$$

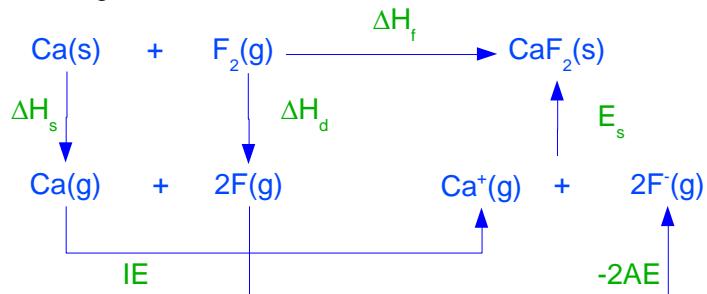
$$\Delta H_s=\text{Ca}(\text{s})\text{-aren sublimazio-entalpia}$$

$$\Delta H_d=\text{F}_2(\text{s})\text{-aren disoziazio-entalpia}$$

$$IE=\text{Ca}(\text{g})\text{-aren ionizazio energia}$$

$$AE=\text{F}(\text{g})\text{-aren afinitate elektronikoa}$$

$$E_s=\text{CaF}_2(\text{s})\text{-aren sare-energia}$$



$$\Delta H_f = \Delta H_s + \Delta H_d + IE - 2AE + E_s$$

8. Molekulen arteko kohesio-indarrak kontuan hartuta, ondorengo baieztapenak komentatu:

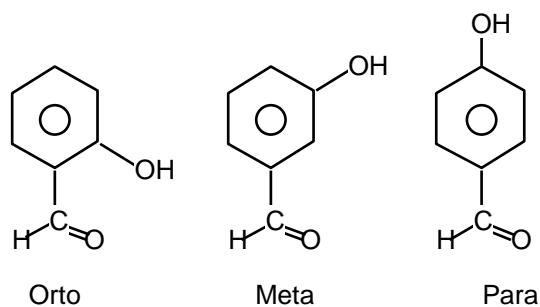
Metanolaren irakite-puntuaren metanoliolarena baino altuagoa da

Oxigenoa, sufrea baino elektronegatiboagoa denez, metanol molekulen artean eratzen diren hidrogeno loturak metanolol molekulen artekoak baino sendoagoak dira, eta horrela metanolaren irakite-puntuaren metanoliolarena baino altuagoa da

Karbono monoxidoaren fusio-puntuaren dinitrogenoarena baino altuagoa da

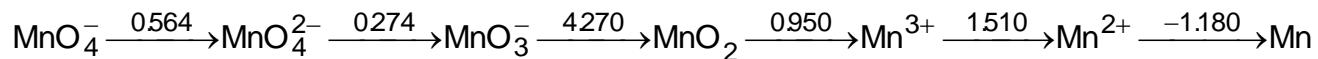
N_2 molekulak guztiz apolarrak dira, CO molekulak, berriz, polarrak dira. Hori dela eta, CO molekulen artean dauden kohesio-indarrak (behin betiko dipoloak) N_2 molekulen artekoak (behin behineko dipoloak) baino sendoagoak dira.

Hidroxibenzaldehidoaren *ortho* isomeroaren fusio-puntuaren *meta* zein *para* isomeroena baino baxuagoa da.



Orto-hidroxibenzaldehidoan H lotura intramolekularrak eratzeko aukera dago; meta eta para isomeroetan berriz ez. Hori dela eta, orto- hidroxibenzaldehido molekulen arteko hidrogeno-loturak ahulagoa dira.

9. Ondokoa manganesoaren Latimer-en diagrama da ingurune azidoan.



Permanganatotik manganeso(IV) oxidora doan eta permanganatotik Mn²⁺ra doan erredukzio-potentzial estandarrak kalkulatu

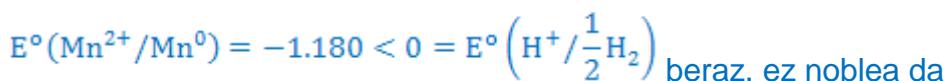
$$E^\circ(\text{MnO}_4^-/\text{MnO}_2) = \frac{0.564x_1 + 0.274x_1 + 4.270x_1}{3} = 1.703$$

$$E^\circ(MnO_4^- / Mn^{2+}) = \frac{0.564x1 + 0.274x1 + 4.270x1 + 0.950x1 + 1.510x1}{5} = 1.512$$

Zein da Mn³⁺/Mn²⁺ bikotearen erredukzio-potenzial estandarra ingurune basikoan?



Manganesoa metal noblea al da? Azaldu laburki



10. Sodio kloruro disoluzio baten pH-a nolakoa da (azidoa, neutroa edo basikoa)? Azaldu laburki



Na⁺(aq) katioia ez-azidoa da

Cl⁻(aq) ioia ez-basea da

Amonio kloruro disoluzio baten pH-a nolakoa da (azidoa, neutroa edo basikoa)? Azaldu laburki



NH₄⁺(aq) katioia azido ahula da ($NH_4^+ + H_2O \leftrightarrow NH_3 + H_3O^+$)

Cl⁻(aq) ioia ez-basea da

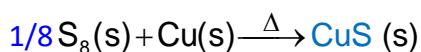
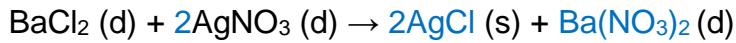
Sodio formiato disoluzio baten pH-a nolakoa da (azidoa, neutroa edo basikoa)? Azaldu laburki



Na⁺(aq) katioia ez-azidoa da

For⁻(aq) ioia basea ahula da ($For^- + H_2O \leftrightarrow HFor + OH^-$)

11. Ondorengo erreakzioetan hutsuneak bete, eta doitu.



12. HgS eta HNO₃ konposatuen arteko erreakzioa HCl ingurunean gertatzen bada, lortzen diren produktuak H₂[HgCl₄], S eta NO dira.

2g H₂[HgCl₄] nahi dira lortu, eta erreakzioaren etekina %85 da. Ondoko kalkulatu:

a) Beharrezkoa den merkuro sulfuroaren masa.

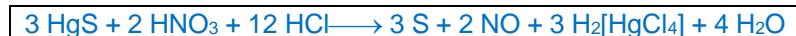
b) Beharrezkoa den azido nitrikoaren bolumena, haren kontzentrazioa 0.2M izanik.

c) Lortzen den nitrogeno monoxidoaren bolumena (50 °C-tan eta 700 Torr-ean neurtua.).

masa atomikoak: H = 1, Cl = 35.45, S = 32, Hg = 200.59

1 atm = 101325 Pa = 760 mmHg = 760 Torr

OHAR: Ariketa honen balioa bikoitza da



Queremos obtener 2 g de H₂[HgCl₄], (H₂[HgCl₄] = 344.42 g), (Rto. 85%)

a) Masa de HgS que se necesita. Pm = 232.65 g

$$3 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4] \Rightarrow 3 \text{ mol HgS}$$

$$2 \text{ g H}_2[\text{HgCl}_4] \cdot \frac{1 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4]}{344.42 \text{ g H}_2[\text{HgCl}_4]} \cdot \frac{3 \text{ mol HgS}}{3 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4]} \cdot \frac{232.65 \text{ g HgS}}{1 \text{ mol HgS}} \cdot \frac{100}{85} = 1.59 \text{ g HgS}$$

b) Volumen de HNO₃ 0.2 M necesario.

$$3 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4] \Rightarrow 2 \text{ mol HNO}_3$$

$$2 \text{ g H}_2[\text{HgCl}_4] \cdot \frac{1 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4]}{344.42 \text{ g H}_2[\text{HgCl}_4]} \cdot \frac{2 \text{ mol HNO}_3}{3 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4]} \cdot \frac{100}{85} = 4.554 \times 10^{-3} \text{ mol HNO}_3$$

$$0.2 \text{ M} = \frac{4.554 \times 10^{-3}}{V} \Rightarrow V = 22.77 \times 10^{-3} \text{ L} = 22.77 \text{ ml HNO}_3$$

c) Volumen de NO que se recoge, (a 700 Torr. y 50 °C).

$$3 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4] \Rightarrow 2 \text{ mol NO}$$

$$2 \text{ g H}_2[\text{HgCl}_4] \cdot \frac{1 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4]}{344.42 \text{ g H}_2[\text{HgCl}_4]} \cdot \frac{2 \text{ mol NO}}{3 \text{ mol H}_2[\text{HgCl}_4]} = 3.871 \times 10^{-3} \text{ mol NO}$$

$$P V = n R T \Rightarrow \frac{700}{760} \cdot V = 3.871 \times 10^{-3} \cdot 0.082 \cdot (273 + 50) \Rightarrow V = 0.11132 \text{ L} = 111.32 \text{ ml NO}$$

13. Ondoko disoluzioen pH-a kalkulatu:

- 0,05 M-eko NH₃ disoluzioa ($K_b = 10^{-4,76}$).
- Aurreko disoluzioaren 10 mL nahastatzen dira 0,05 M-ekoa den HCl disoluzio baten 5 mL-rekin.
- HCl disoluzioaren beste 5 mL gehitzen dira.

OHAR: Ariketa honen balioa bikoitza da

a) NH₃ 0,05 M,



$$\text{MB: } c_{\text{NH}_3} = 0,05 = [\text{NH}_3] + [\text{NH}_4^+]$$

$$\text{KB } [\text{NH}_4^+] + [\text{H}_3\text{O}^+] = [\text{OH}^-]$$

$$\text{Hurbilketak: } c_{\text{NH}_3} = 0,05 \approx [\text{NH}_3] \text{ eta } [\text{NH}_4^+] \approx [\text{OH}^-]$$

$$K_b = 10^{-4,76} = \frac{[\text{OH}^-]^2}{0,05}$$

$$[\text{OH}^-] = \sqrt{0,05 \times 10^{-4,75}} = 9,43 \times 10^{-5}$$

$$\text{pOH} = -3,02, \text{pH} = 10,98$$

b) Aurreko disoluzioaren 10 mL nahastatzen dira 0,05 M-ekoa den HCl disoluzio baten 5 mL-rekin.

$$10 \text{ mL NH}_3 \text{ 0,05 M} \quad 0,5 \text{ mmol}$$

$$5 \text{ mL de de HCl 0,05 M} \quad 0,25 \text{ mmol}$$

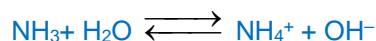


HCl	NH ₃	NH ₄ Cl
0,25 mmol	0,5 mmol	-
-	0,25 mmol	0,25 mmol

Disoluzio indargetzailea

$$[\text{NH}_3] = \frac{0,25}{15} = 0,017 \text{ M}$$

$$[\text{NH}_4\text{Cl}] = \frac{0,25}{15} = 0,017 \text{ M}$$



$$K_b = 10^{-4,76} = \frac{[\text{OH}^-][\text{NH}_4^+]}{[\text{NH}_3]} \sim \frac{[\text{OH}^-] C_a}{C_b} \sim [\text{OH}^-]$$

$$\text{pOH} = -\log K_b = 4,76, \text{pH} = 9,24$$

c) HCl disoluzioaren beste 5 mL gehitzen dira.

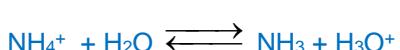
10 mL NH₃ 0,05 M 0,5 mmol

5 mL HCl 0,05 M 0,25 mmol

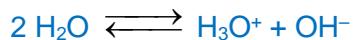


NH ₃	HCl	NH ₄ Cl
0,25 mmol	0,25 mmol	0,25 mmol
-	-	0,5 mmol

$$[\text{NH}_4\text{Cl}] = \frac{0,5}{20} = 0,025 \text{ M}$$



$$K_a = \frac{K_w}{K_b} = \frac{[\text{NH}_4\text{OH}][\text{H}^+]}{[\text{NH}_4^+]}$$



$$K_w = 10^{-14} = [\text{H}_3\text{O}^+] [\text{OH}^-]$$

$$\text{MB } c(\text{NH}_4\text{Cl}) = 0,025 = [\text{Cl}^-] = [\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3]$$

$$\text{KB } [\text{OH}^-] + [\text{Cl}^-] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{NH}_4^+]$$

$$[\text{OH}^-] + [\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3] = [\text{H}_3\text{O}^+] + [\text{NH}_4^+]$$

$$[\text{OH}^-] + [\text{NH}_3] = [\text{H}_3\text{O}^+]$$

Hurbilketak

$$0,025 \approx [\text{NH}_4^+]$$

$$[\text{NH}_3] \approx [\text{H}_3\text{O}^+]$$

$$K_a = \frac{K_w}{K_b} = \frac{[\text{NH}_4\text{OH}][\text{H}^+]}{[\text{NH}_4^+]} \sim \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{C_s}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = \sqrt{0,025 \times K_a} = 1,44 \cdot 10^{-11}$$

$$\text{pH} = 5,42$$