

Solid State Chemistry (slechts vragen van vorig jaar -> vak wordt nog niet zo lang gegeven)

1) Een stof NH_4X heeft bij kamertemperatuur een bcc eenheidscel met $a = 0,455 \text{ nm}$. Bij 138°C heeft het dezelfde eenheidscel als NaCl (fcc) met $a = 0,675 \text{ nm}$.

- a) Bij kamertemperatuur heeft de polymorf een dichtheid van $2,34 \text{ g/cm}^3$. Om welke stof gaat het?
- b) Teken de eenheidscel van de polymorf bij kamertemperatuur en duid de octahedrische en tetrahedrische holten aan (met coördinaten)
- c) de straal van NH_4^+ is $0,15 \text{ nm}$. Wat is de straal van het anion? Raken de anionen elkaar in het rooster? (op 138°C)
- d) Bespreek 2 manieren waarop een coating zou kunnen gemaakt worden.

2) Een fasediagram van MgO en SiO_2 .

- toepassen van lever rule
- samenstelling van de fasen geven.
- eutectisch punt aanduiden en zeggen wat het is.
- Geef 2 voordelen en 2 nadelen van het gebruik van MgO in plaats van Mg voor technologische doeleinden.

3) Bespreek de Michelson interferometer. Ten opzichte van dispersieve spectrometrie zijn er enkele voordelen verbonden aan FT-IR. Deze zijn genoemd naar een wetenschapper. Bespreek deze 3 voordelen in de context van FT-IR. (ofzo)

4) Leg uit

Zeotype
SBA-15
CEC
shapeselectivity

5) NaK lineaire keten (hypotetisch)

Bandgap, CB, metalisch of semiconductor? Energieverschil en V zijn gegeven
Absortiespectrum van keten
Emissiespectrum van keten als pn junctie

elektrochemie

Deel strubbe

- 1) leid de BV-vergelijking af voor metaal/metaalion-elektrode
- 2) bespreek de Li-batterij

- 3) leid een uitdrukking af voor de potentiaalverdeling in de diffuse dubbellaag volgens Gouy Chapman. (Verschillende formules gegeven)
- 4) waarom is een leclanche cel een primaire batterij? Waarom werd ze vervangen door de alkalische mangaanbatterij?
- 5) Butler-Volmer afleiden voor metaalion reactie met 1 elektron

Oefeningen

- 1) bipotentiometrische meting van een titratie
- 2) Tabel zoals in werkcolleges waar je moet invullen of een factor al dan niet invloed heeft op de verschillende overpotentialen.

Chemometrie

- 1) Termen verklaren in 10 tot 20 woorden

- expanded uncertainty
- in Doe: COST
- Ward
- Kaiser criterium
- conditionele probabilliteit
- standard error
- box en wilson design
- partitionering bij CA
- communaliteit
- mahalanobis afstand
- Coëfficiënt of variation
- Taguchi (alléja Plackett-Bruman dus e!)
- ANOVA is robuust
- Gewogen lineaire regressie
- Bias
- Simplex
- Gefixeerde factoren
- Residu
- (niet-)hiërarchische clusteranalyse

- 2) Ahv de ANOVA tabel (gegeven): welke informatie levert de 'lack of fit' toets op
- 3) je meet 4 verschillende elementen Mo, P, K, Ni van 16 rijstmonsters zowel gepelde (P) als ongepelde (U), 2 variëtiëten (A en B) en groeiend in een droog (D) of nat (W) seizoen
 - Vallen de rijstmonsters uiteen in groepen? En welke eigenschap is verantwoordelijk voor dit uiteenvallen: P/U, A/B, D/W
 - iets met onderscheid tussen P en U? Welke elementen zijn overbodig om dit onderscheid te maken

4) Beschrijf de overeenkomsten en verschillen tussen principale component-analyse en discriminantanalyse.

5) Formule p 5/7 gegeven (onzekerheid $x(s)$).

Hoe kunnen we de onzekerheid zo klein mogelijk maken?

Is het mogelijk dat de onzekerheid in de limiet naar 0 gaat?

Trends in organische chemie

- 1) Ugi-reactie in EtOH 90°C; 4 componenten zijn gegeven. Geen ervan zat op de vaste fase, één ervan had een trimethylsilylgroep. Afwerken met TBAF (tetrabutylammoniumfluoride) in THF. Geef het eindproduct (mechanisme is optioneel) en bespreek hoe je de isolatie en zuivering van dit product efficiënter kan laten verlopen.
- 2) Een alkyn met op de beta-plaats een positief geladen primair amine reageert met een azide met op de gamma-plaats opnieuw een positief geladen aminegroep. Geef mogelijke eindproducten. Als in het medium een bepaalde structuur (cyclisch hexameer, ik teken dat lekker niet maar het heeft een cilindervorm met polaire groepen aan het uiteinde van de buis) wordt toegevoegd, welke invloed (selectiviteit, kinetiek) heeft dat?
- 3) Iminekatalyse van Diels-Alder-reacties, het standaardvoorbeeld van in de les: bespreek de verkregen stereochemie.

Mico

deel prof Adriaens

- 1) Je hebt zo een elektronstraal dat met Cu van 10µm dik interageerd en een interactievolume is getekend.
Teken en/of zegt wat er gebeurt bijvoorbeeld, als je niet CU maar C hebt. Of als je elektronstraal een verdubbeling van energie krijgt. Je ondere een andere hoeke bestraalt etc (bespreken van toename in secundaire elektronen en doorgelaten elektronen (of afname^^)
- 2) Figuur met een Cu-staal, gecoat met een laagje van 50nm Au. Er worden hoogenergetische H⁺ ionen op afgestuurd en ze worden verstrooid onder een hoek van 150°. De kinematische factor van Cu en Au zijn gegeven. (iets van 0,94 en 0,98 resp.)
Teken kwalitatief het RSB spectrum dat je bekomt.
- 3) Gegeven is een referentiefiguurtje: 20 keV elektronen, een Cu sample van 10µm dikte, elektronenbundel valt in onder 90°. Het interactievolume (zo'n ding dat met Monte Carlo benaderingen gegenereerd werd) is typisch peervormig en ongeveer 2.5 µm in zijn langste punt.
- 4) Bespreek interactievolume en detectie van teruggestrooide bundel en doorgelaten bundel als:
-20 keV -> 10 keV
-Cu -> C
-10µm -> 0.1 µm
-90° -> 20°

- 5) Hoe kan ELKE besproken techniek bijdragen aan de chemische én structurele karakterisatie van een Cr (kleiner dan een μm) laagje op een Al matrix. Klein detail is dat CrO_6 (geel chroom) gebruikt wordt. Mondelinge vraag is dan: als je er twee zou kunnen kiezen die complementair werken en zoveel mogelijk info geven, dewelke?
- 6) 1) a. Bespreek de voor en nadelen van energiedispersieve x stralen detector EDX versus golflengte dispersieve x stralen detectie WDX.
- 7) b. Hoe bereken je de minimaal detecteerbare concentratie bij EDX?
- 8) 2) een AgX (met X=halide) in een gelatine matrix, microkristal structuur, bespreek hoe alle technieken die we hebben gezien al dan niet kunnen bijdragen tot de oppervlak karakterisering.

deel prof Vanhaecke:

- 1) Pb datering: benoem de curven
- 2) beetje meerkeuze vragen, leg de curve uit (tging over zo een conkweetniwat curve die algemeen geldt)
- 3) Beetje over radioisotopen vs stabiele isopen (4stellen, waar of niet en waarom)
- 4) Leg spectrale interferentie (vooral het vermijden ervan) uit bij bij Tims en MCICPMS
- 5) Discordant/concordant, dat figuurtje: een aantal punten op de curves en de curves zelf zijn gemarkeerd, leg elk punt kort uit en leg langer uit waarom "deze curve algemeen geldig is". Toename of afname van lood, afname van uraan?
- 6) Over tracerexperimenten: radionucliden versus aangerijkte stabiele zware isotopen. Welke stellingen zijn juist of fout en motiveer:
 - Radionucliden brengen gezondheidsrisico mee.
 - Radionucliden ondervinden massadiscriminatie.
 - Aangerijkte stabiele isotopen kunnen (!) zonder (!) staalname gemeten worden.
- 7) Hoe kan men spectrale interferentie zo goed mogelijk elimineren in MC-ICPMS en TIMS.
- 8) figuur boorzuur en boraat, hoe kan je $\delta(13\text{C})$ verloop verklaren ifv pH en idem voor zeewater. kan je als je weet dat B zonder fractionatie wordt ingebouwd in koraal hiermee dan datering uitvoeren?
- 9) leg uit: ^{14}C -datering en de voordelen van AMS hierbij+ hoe is dit praktisch een voordeel
- 10) vier juist/fout vragen in verband met Sr/Rb datering

deel prof Boeckx:

- 1) figuur bio degradatie tolueen (uit zijn slides), verklaar waarom $\delta(13\text{C})$ waarde stijgt, welke factor ontbreekt nog voor berekening van tolueenconcentratie? en welke apparatuur gebruik je om deltawaarden te berekenen?
- 2) vraag waar je drie delta-waardes krijgt en dan %S1 en %S2 moet berekenen, simpele formule
- 3) je wil 150 gram ureum met 2,5 atoom % ^{13}C in excess, een firma vraagt zoveel euro per gram ^{13}C , bereken hoeveel je moet betalen.

voor maagzweeronderzoek: hoe kan je maagzweer detecteren?

- 4) Bespreek isotopendilutie (zie ook Vanhaecke's stukje over spike toevoegen). Met de veronderstellingen die je maakt bij isotopendilutie, is de stelling "fractionatie treedt niet op bij tracerexperimenten" juist of fout?
- 5) Het figuurtje dat hoort bij derivatisatie: als je koolstoffen toevoegt dan wordt de onzekerheid op de gemeten massa groter naarmate je meer koolstoffen toevoegt of er minder koolstoffen oorspronkelijk in de verbinding zaten. Dit dus in het lang en het breed uitleggen.
- 6) Een vraagstuk over ureum in excess, kostprijs berekenen. Het ureum werd gebruikt om uit te pluizen of een groep personen een maagzweer heeft. Wanneer is het resultaat van de test positief (wanneer zweren magen)?

MPC

- 1) Roostermodel - ontmenging bij het regulier mengsel.
- 2) Valentiebindingstheorie introduceert een kijk op chemische reactiviteit die de rigoureuze behandeling op basis van potentiaal energie oppervlaktes wil verzoenen met meer intuïtieve modellen. Leg uit aan de hand van nucleofiele substitutiereacties.

3) Botsingstheorie levert een uitdrukking op voor de snelheidsconstante van een tweede orde gasreactie van de vorm

Interpreteer deze uitdrukking in termen van fluctuaties.
$$k(T) = N_A^2 \sigma_{AB} \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}}$$

4) mondeling, zonder voorbereiding: Figuur van potentiële energieoppervlak van reactie tussen HaHb en Hc uitleggen (de 3D en de 2D versie)

5) Zo wat alles over diffusie. Einstein Smoluchowski linken aan fluctuaties enzo.

6) figuur 11.4 : free energy of mixing for a polymer solution, ... bespreek figuur

7) in de cursus staan de volgende twee formules: $[B](x,t) = [B] / \sqrt{\pi D t} \exp(-x^2/4Dt)$ en

$P(x,t) = (2 \tau / \pi t)^{1/2} \exp(-x^2 \tau / 2 t \lambda^2)$ (formules 12.6 en 12.8)

Vraag: bespreek het verband tussen de 2 formules

7) gegeven was het contourdiagram van het potentieel energieoppervlak van Fluor met deuterium-deuterium . (ziet er redelijk wat anders uit dan van H-H-H)

- bespreek het diagram
- leg via configuration mixing uit waarom er asymmetrie is voor activeringsenergie en ligging transitietoestand

- 8) figuur femtochemie
- 9) transitietoestandstheorie
- 10) Oefening waarbij viscositeit, straal deeltje, temperatuur gegeven zijn. En daarbij ook nog de volgende gegevens:
 - t 30 60 90 seconden
 - delta x 7,1 10,6 11,3 cm⁻⁴Gevraagd: bepaal aan de hand van deze gegevens de constante van Avogadro.

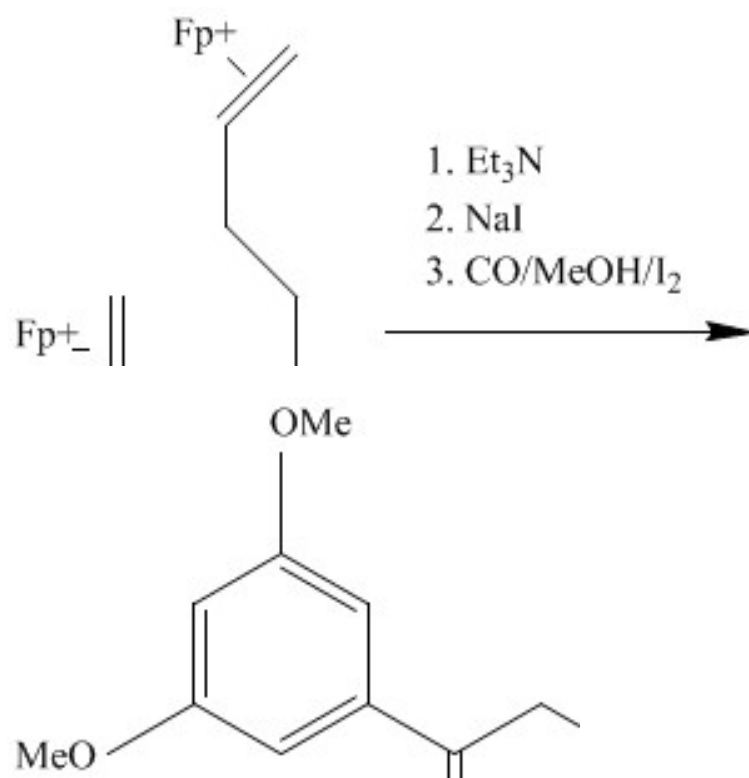
Organometallics and Catalysis

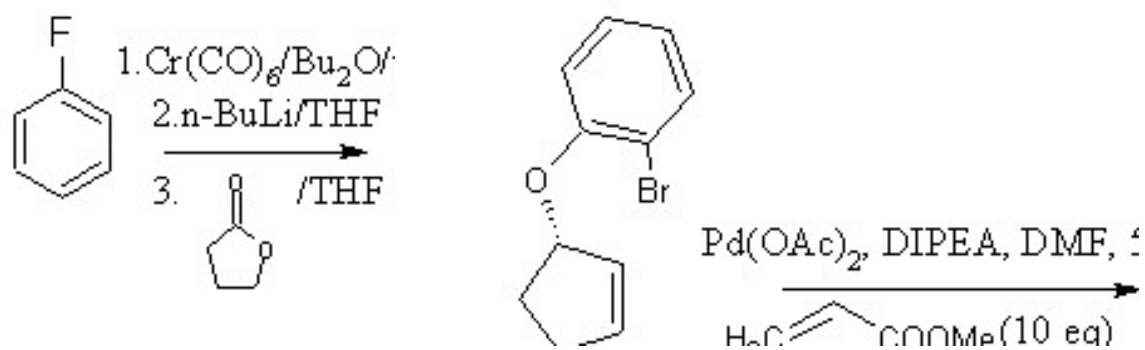
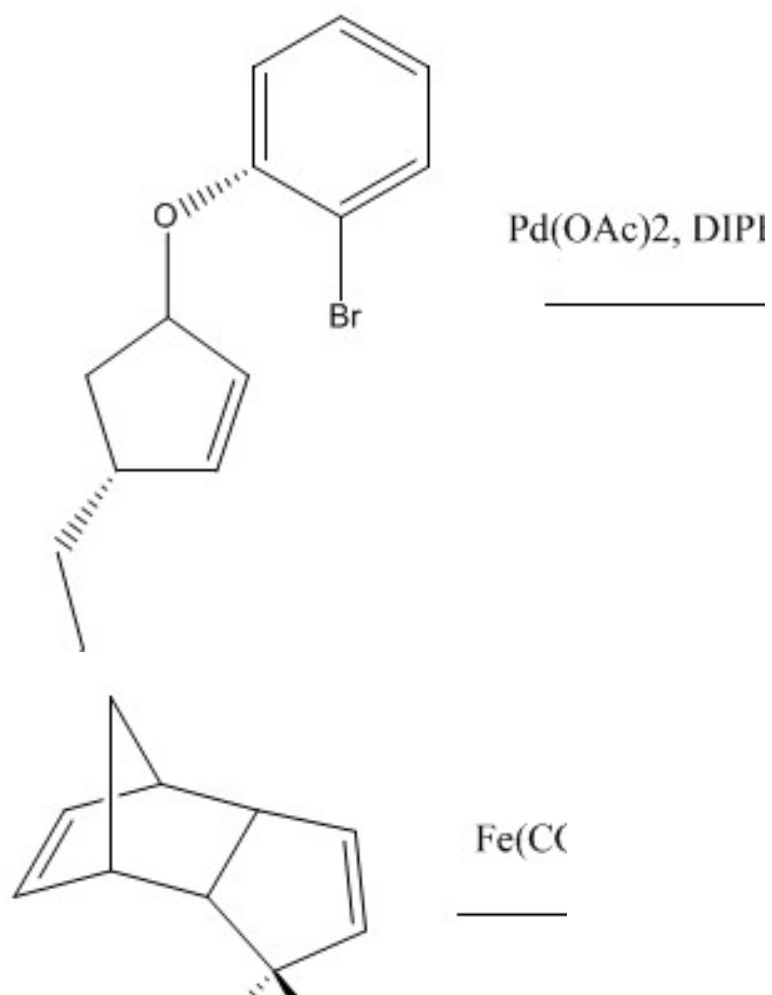
verpoort

- 1) Je krijgt 5 reeksen van 2 complexen
- 2) Welk complex zal sneller CO afsplitsen en waarom (niet zo simpel)
- 3) Alles over CO wat je weet
- 4) een katalytische cyclus en we moesten de processen bespreken ((soms duidelijk) soms wat minder
- 5) bespreek Reductieve eliminatie
- 6) pi liganden
- 7) Op welk complex wordt CO het sterkst gebonden en leg uit. (5 verschillende oefeningen, telkens kiezen tussen 2 mogelijkheden)
- 8) 5 reacties waarbij de reactie benoemd moet worden (bv oxidatieve additie, reductieve eliminatie, ...). Meerdere stappen zijn mogelijk, als dit het geval is, vermeld de goede volgorde.
- 9) discuss nucleophilic attack at ligand
- 10) weer zo'n reeks CO-liganden en dan ordenen volgens IR-golftal
- 11) carbenen
- 12) katalytische cyclus, stappen benoemen en nog een rare vraag erbij...
- 13) bij welke complexen gaat er CO het gemakkelijkst af en waarom
- 14) bespreek olefine metethese
- 15) waarom is dit een beter pi acceptor ligand dan dat
- 16) bespreek fosfineliganden
- 17) carbeenliganden

- 18) 5 keer 2 complexen, welke van de 2 coordineert CO het sterkst + waarom? & telkens de elektronen tellen
- 19) NO+, sterker/gelijk/zwakker pi-back-bonding dan CO en waarom ?
- 20) - 2 reacties, ligandsubstitutie waarbij CO vervangen wordt door PMe₃, gegeven dat reactie A vlugger gaat dan B, waarom is dat zo ?
- 21) - katalytische cyclus: verschillende stappen benoemen
- 22) - NHC-liganden

Van der Eycken





Polymeer materialen

Prof. P. Dubruel

- 1) PDMS is a polymer which has acquired industrial relevance in previous decades.
 - a. How is this polymer synthesized?

- b. Give two different ways in which this polymer (or a derivative) can be converted in a cross-linked structure.
 - c. Describe two applications of this polymer and correlate them to the low T_g of PDMS.
- 2) Describe shortly (1/2 A' maximum per part) the following polymer related terms.
 - a. SPR
 - b. Swelling of hydrogels
 - c. PHEMA
 - d. PMA for optical applications
 - e. PTFE
 - 3) Welke soort hydrogel stel je voor, ter gebruik in tropische gebieden, die overdag hydrofoob en 's nachts hydrofiel is? Hoe ben je zeker dat voorgestelde hydrogel permanent is? Thermodynamische aspecten?
 - 4) META (adhesion promotor)
 - 5) XPS
 - 6) poly (styrene-co-butadiene)

prof. Du Prez

- 1) Discuss stress relaxation for a viscoelastic model. Where does this phenomenon occur in 1) Stress-strain testing and 2) Shape memory materials (refer to practical course).
- 2) Describe the rubber state, draw a log E vs T graph, discuss trends in T_g and log E for non-, weakly and strongly vulcanized rubbers.
- 3) a. Describe the principle, possibilities and limits of differential Scanning calorimetry.
 b. Draw the DSC-curve (heating) of a semi-crystalline polymer that was slowly cooled down from the molten state to its optimal crystallation temperature and, after a long time, slowly cooled down below T_g
 c. Explain which information you could expect from the DSC-curves of a polymer network that consist of 50% of semi-crystalline polymer and 50% of an amorphous polymer, both in case of a homogeneous and a heterogeneous network. Refer also to the DSC experiments performed during the project during on shape memory polymers.
- 4) 2. Describe in detail the four different steps in polymer processing. In your descriptions, refer to the relevant behaviour of a polymer in its different states. Also explain why the processing of a thermoset and rubber is intrinsically compared to that of a thermoplastic polymer.