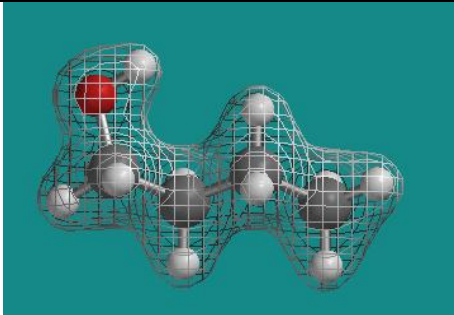
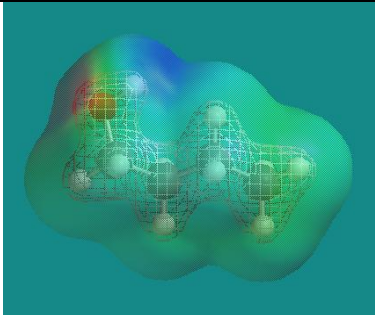
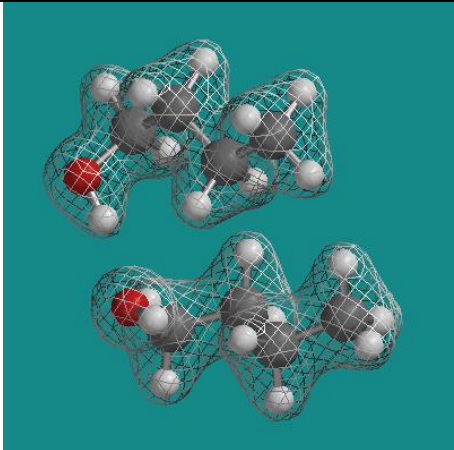
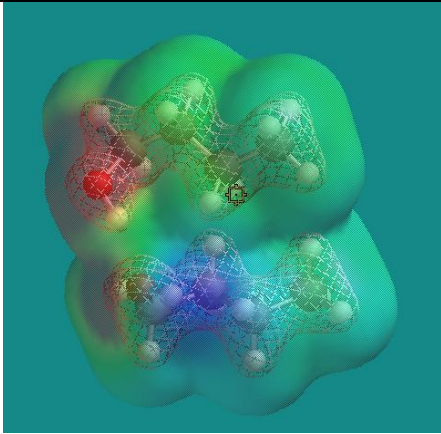


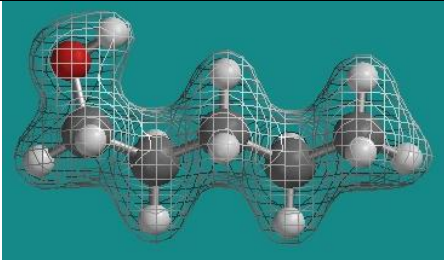
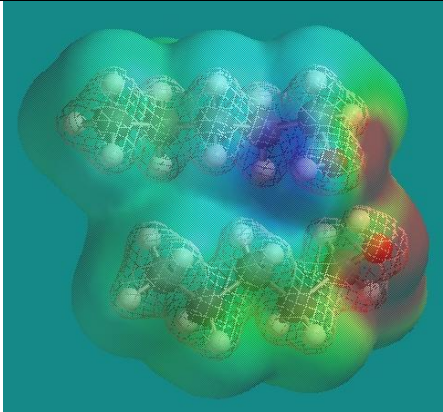
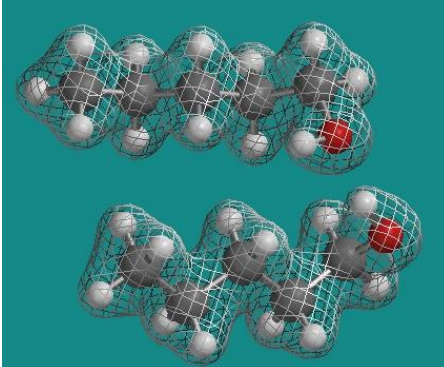
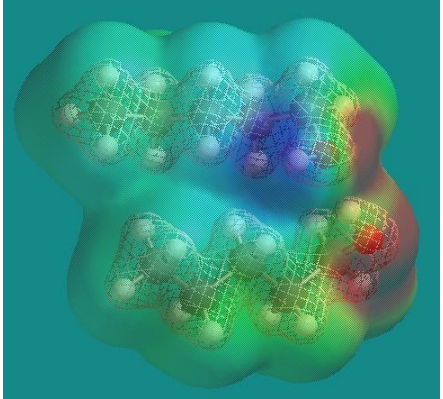
Uitwerking van opdrachten 3 en 4 (hoofdstuk 3, nanocoatings)

molecuulmodellen en energieberekeningen waterstofbruggen vergeleken met vanderwaalskrachten

	skeletmodel + wolk van bindingselektronen	model + vanderwaalsoppervlak	Vormings- energie (kJ/mol)
1 mol 1-butanol C_4H_9OH			-290,40
2 mol 1-butanol			-299,50

Naam	Energie (kJ/mol)	Energievoordeel door H-brugvorming bij de vorming van 2 mol 1-butanol		
1-butanol	-290,40	Verwachte energie (kJ/mol)	'echte' energie (kJ/mol)	Energievoordeel door H-brugvorming (kJ/mol)
		-290,40	-299,50	- 299,50 – (-290,40) = - 9,10

Naam	Energie (kJ/mol)	Energievoordeel door vanderwaalsbindingen bij de vorming van 2 mol hexaan.		
hexaan	-166,95	Verwachte energie (kJ/mol)	'echte' energie (kJ/mol)	Energie voordeel door vanderwaalsbindingen (kJ/mol)
		-166,95	-175,87	-8,92

	skeletmodel + elektronenwolk (wolk van bindingselektronen)	model + vanderwaalsoppervlak	Vormings-energie (kJ/mol)
1 mol 1-pentanol $C_5H_{11}OH$			-313,10
2 mol 1-pentanol			-323,36

Naam	Energie (kJ/mol)	Energievoordeel door H-brugvorming bij de vorming van 2 mol 1-pentanol		
1-pentanol	-313,10	Verwachte energie (kJ/mol)	'echte' energie (kJ/mol)	Energie voordeel door H-brugvorming (kJ/mol)
		-313,10	- 323,36	-10,26

Samengevat

molecuul	Molmassa (g/mol)	Voordeel door	kJ/mol	% extra t.o.v. vdwaals
pentaan = C ₅ H ₁₂	72	vanderwaals	-7,54	
1-butanol = C ₄ H ₉ OH	74	H-brug	-9,10	20,7
hexaan = C ₆ H ₁₄	86	vanderwaals	-8,92	
1-pentanol = C ₅ H ₁₁ OH	88	H-brug	-10,26	15,0