

# Kemi Aflevering 16

Jeppe Møldrup

## Opgave 1

- a. Angiv en egnet indikator til kolorimetrisk titrering af syren med natriumhydroxidopløsning

Jeg har valgt indikatoren Thymolblåt, idet den har et farveskift omkring ved pH 8.0, som er aflæst på grafen til cirka at være ækvivalenspunktet.

- b. Bestem syrens molare masse

Jeg starter med at finde ækvivalenspunktet ved at finde ændringen i pH per datapunkt, og så finde hvor denne ændring er størst. Jeg har fundet at ændringen er størst ved datapunkt 63. Så volumnet er 31.66 mL.

Natriumhydroxiden har en koncentration på 0.0986 M. Så jeg ganger med volumnet for at finde stofmængden

$$0.0986 \text{ M} \cdot 31.66 \text{ mL} = 0.003127 \text{ mol}$$

Syren og natriumhydroxiden reagerer med et forhold på 1:1. Så jeg tager massen af syren og dividerer med stofmængden for at finde den molare masse

$$\frac{0.254 \text{ g}}{0.003127 \text{ mol}} = 81.87 \text{ g/mol}$$

Så den molare masse af syren er 81.9 g/mol

- c. Beregn, hvor stor en proceentdel af den ildelugtende syre, der findes på baseform i urin med pH 4.5 og temperaturen 25°C.

Jeg vil finde  $pK_s$ , der ligger på grafen ved halvdelen af ækvivalenspunktet. Så jeg finder pH for ækvivalenspunktet ligesom sidste opgave, som

bliver 8.4. Halvdelen af det er

$$pK_s = \frac{8.68}{2} = 4.2$$

Nu hvor jeg har  $pK_s$  kan jeg finde forholdet mellem den ildelugtende syre, og dens korroponderende base via pufferligningen

$$pH = pK_s + \log \left( \frac{[B]}{[S]} \right)$$

Så jeg indsætter og finder forholdet

$$\text{solve}(4.5 = 4.2 + \log(x), x) \rightarrow x = 1.9953$$

Så for hver 1 mol syre, er der 1.9953 mol base. Så jeg finder hvor mange procent syren udgør

$$\frac{1 \text{ mol}}{1 \text{ mol} + 1.9953 \text{ mol}} = 33.39\%$$

Så ved pH 4.5 ville 33.4% være på syreform, dvs. resten må være på baseform, så jeg trækker det fra 100%

$$100\% - 33.4\% = 66.6\%$$

Så 66.6% ville være på baseform ved pH 4.5

## Opgave 2

- a. Beregn stofmængden af det euforiserende stof A i denne rusdosis

For at finde stofmængden, dividerer jeg massen med den molare masse

$$n(A) = \frac{m}{M} = \frac{1.10 \text{ g}}{149.19 \text{ g/mol}} = 0.00737 \text{ mol}$$

Så stofmængden af stoffet A er 0.00737 mol.

- b. Bestem molekylformlen for A.

Jeg starter med at tage masseprocenterne for hvert atom og se hvor meget af den molare masse de udgør, derefter dividerer med atomernes individuelle molare masser for at finde hvor mange der er af hver atom.

$$C : \frac{0.7246 \cdot 149.19 \text{ g/mol}}{12 \text{ g/mol}} \approx 9$$

$$H : \frac{0.0743 \cdot 149.19 \text{ g/mol}}{1 \text{ g/mol}} \approx 11$$

$$N : \frac{0.0939 \cdot 149.19 \text{ g/mol}}{14 \text{ g/mol}} \approx 1$$

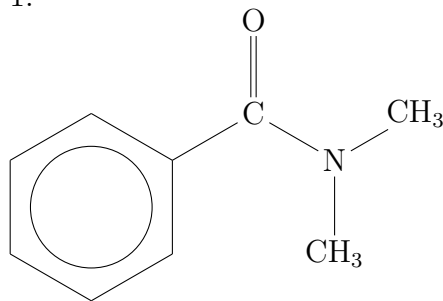
$$O : \frac{0.1072 \cdot 149.19 \text{ g/mol}}{16 \text{ g/mol}} \approx 1$$

Så molekylformlen for stof A er  $C_9H_{11}NO$

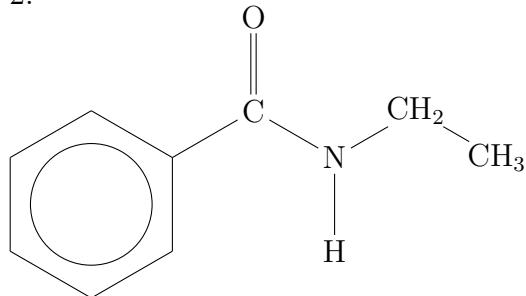
- c. Argumentor for, hvilke funktionelle grupper der findes i X. Generer  $^1H$ -NMR-spektre af to mulige strukturer for A ved 200 MHz.

Idet der er et O og et N atom, tænker jeg at der må være en amid-gruppe i molekylet. Så jeg har lavet de to strukturer

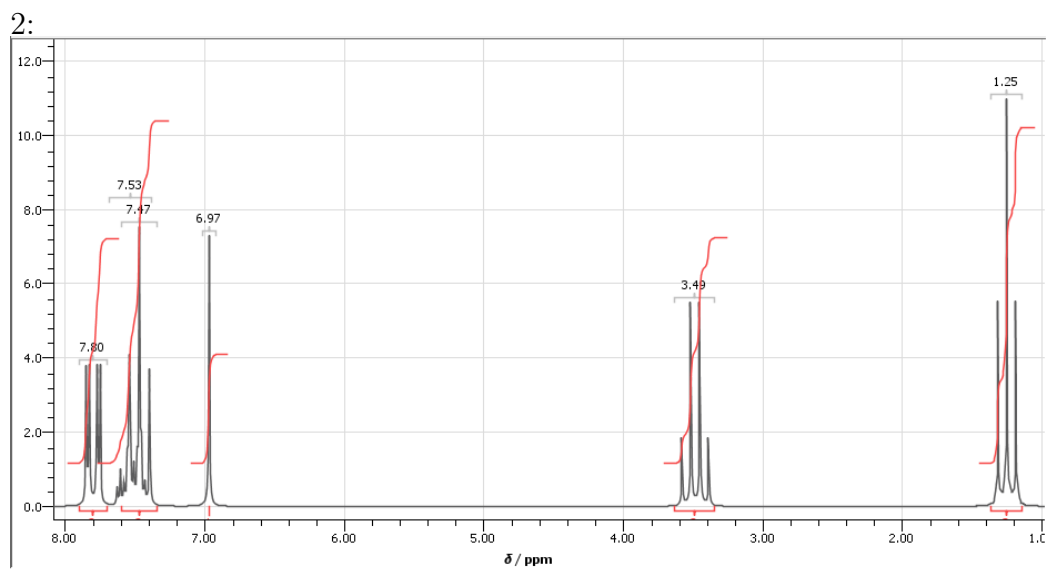
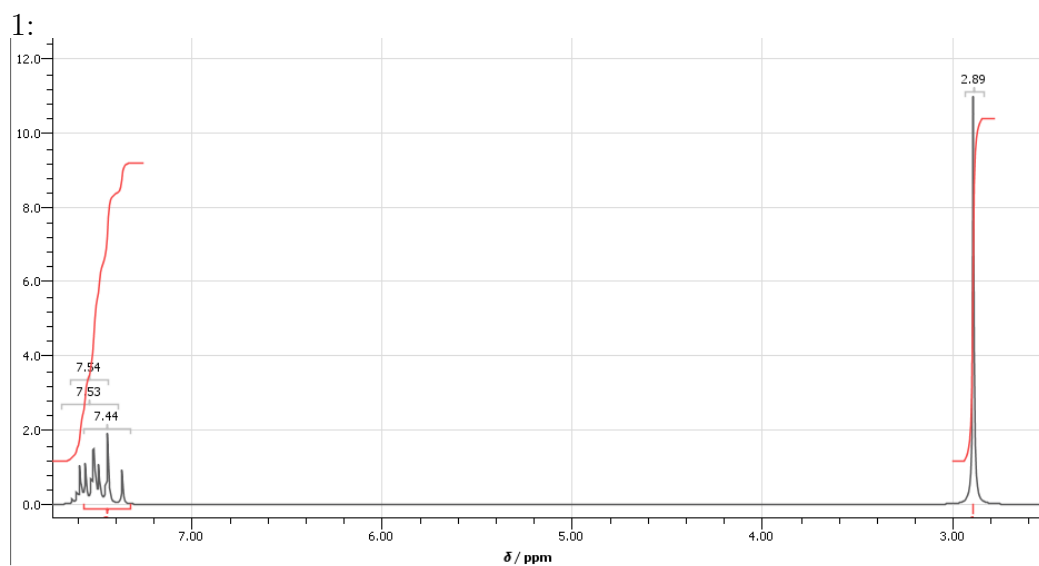
1:



2:



Genererede  $^1H$ -NMR-spektrerne bliver



- d. Bestem strukturen for B. Argumenter ud fra integralkurve, kemisk skift og koblingsmønstre.

## Opgave 3

- a. Gør rede for, at memantin er en base. Bestem  $pK_b$  for memantin ved 25°C.

N-atomet i en amin-gruppe kan optage et ekstra H-atom. Derfor kan memantin opføre sig som en base.  $pK_s$  for memantin er 10.7, så jeg kan finde  $pK_b$  med formlen

$$pK_s + pK_b = 14.00 \Leftrightarrow pK_b = 14.00 - 10.7 = 3.3$$

Så  $pK_b$  for memantin er 3.3

- b. Angiv reaktionstype for reaktion 1 og for reaktion 3

Reaktion 1 er en substitutionsreaktion hvor H bliver substitueret med Br.

Reaktion 3 er en opløsning i vand hvor det andet molekyle der bliver dannet er ethansyre.

- c. Gør rede for, hvilke forskelle der er i IR-spektre af stofferne B, C og memantin, idet karakteristiske absorptionsbånd over  $1500\text{ cm}^{-1}$  indrages.

C og memantin vil begge give udslag ved omkring 3250-3500 pga. N-H strækning i aminer. C vil give udslag ved 1600-1750 pga. C=O strækning i carbonyl-forbindelser.

- d. Forklar grafens forløb. Argumenter ud fra memantins struktur og syre-base-egenskaber.

Memantins opløses let ved lavere pH idet der er flere af den på memantins base form. Mens ved højere pH er memantin meget mindre opløselig ved højere pH idet der så vil være flere på syre form.

## Opgave 4

- a. Angiv reaktionstype for reaktionen mellem bromid og bromat.

Reaktionen er en redox-reaktion hvor bromid

- b. Beregn koncentrationen af det dannede dibrom i reaktionsblandingen i kuvetten, når reaktionen er forløbet til ende

Der bliver tilsat 20  $\mu\text{L}$  0.1 M  $\text{KBrO}_3$  som er den begrænsende reaktant. Jeg udregner stofmængden ved at gange koncentrationen med volumnet.

$$0.1 \text{ M} \cdot 20 \mu\text{L} = 0.00002 \text{ mol}$$

dibrom bliver dannet af bromat med forholdet 3:1. Så der bliver dannet 0.00006 mol dibrom. Hele volumnet er 3000  $\mu\text{L}$  = 0.003 L. Så koncentrationen af dibromet er

$$\frac{0.0006 \text{ mol}}{0.003 \text{ L}} = 0.2 \text{ M}$$

- c. Bestem den molare absorptionskoefficient for dibrom ved 390 nm.

Jeg bruger lambert beers lov

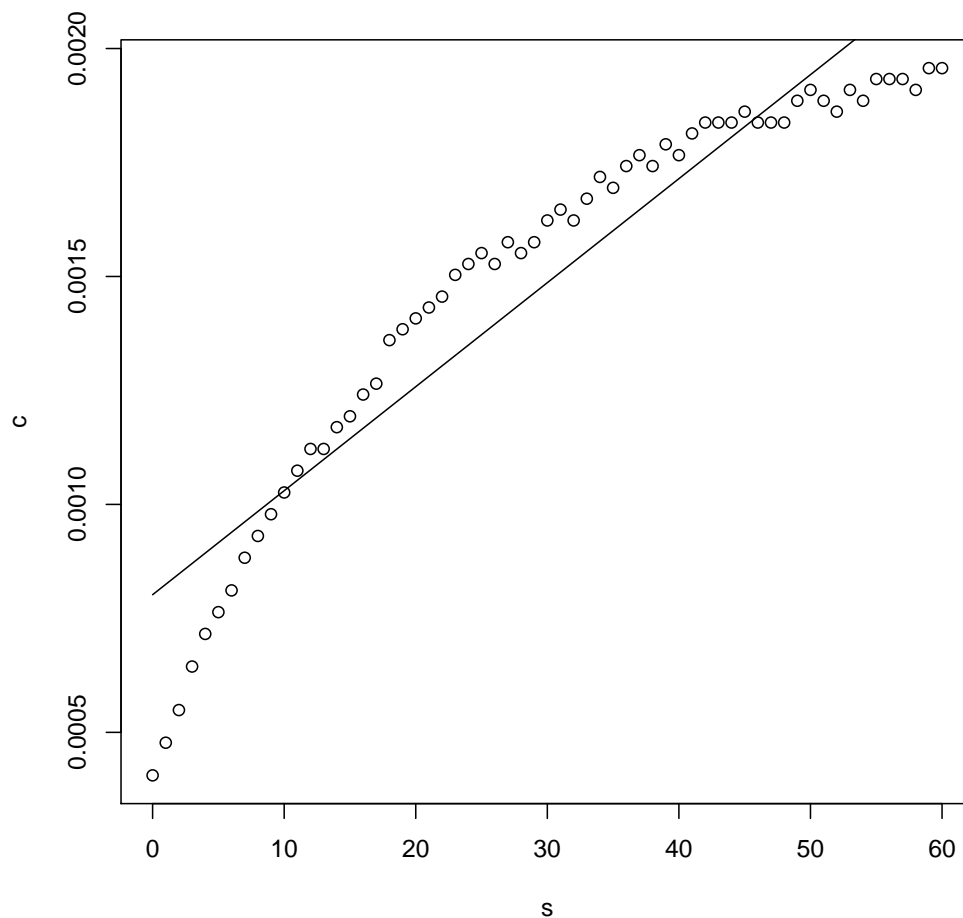
$$A = \epsilon \cdot l \cdot c$$

hvor  $l = 1 \text{ cm}$ , koncentrationen  $c = 0.2 \text{ M}$  og Absorbansen er 0.838. Så jeg indsætter

$$0.838 = \epsilon \cdot 1 \text{ cm} \cdot 0.2 \text{ M} = 4.19 \text{ L}/(\text{cm} \cdot \text{mol})$$

Så den molare absorptionskoefficient for dibrom ved 390 nm er 4.19  $\text{L}/(\text{cm mol})$

- d. Vis, at reaktionen er af første orden med hensyn til bromat. Angiv en forskrift for koncentrationen af bromat som funktion af tiden.



Den bedste ”match” til grafen er den for en første ordens reaktion hvor forskriften for koncentrationen er

$$[\text{Br}_2] = \frac{A(s)}{\epsilon}$$

- e. Bestem reaktionsordnerne  $y$  og  $z$  og reaktionens hastighedskonstant  $k$  ved 25°C.

I forsøg 1 og 2 er koncentrationen af hydroner konstant. Så derfor afhænger hastigheden kun af bromid. Så jeg opstiller de to ligninger

$$3.7 \cdot 10^{-5} = k^* \cdot 0.167^x$$

$$7.3 \cdot 10^{-5} = k^* \cdot 0.333^x$$

Så kan jeg finde x idet jeg har 2 ligninger med to ubekendte

$$\text{solve}(3.7 \cdot 10^{-5} = \frac{7.3 \cdot 10^{-5}}{0.333^x} \cdot 0.167^x, x) \rightarrow x = 0.985 \approx 1$$

ligeledes er koncentrationen af bromid i reaktion 1 og 3 konstant.

$$3.7 \cdot 10^{-5} = k^* \cdot 0.167^x$$

$$14.6 \cdot 10^{-5} = k^* \cdot 0.333^x$$

så jeg finder x

$$\text{solve}(3.7 \cdot 10^{-5} = \frac{14.6 \cdot 10^{-5}}{0.333^x} \cdot 0.167^x, x) \rightarrow x = 1.989 \approx 2$$

Så finder jeg  $k$  ved at isolere fra hastighedsudtrykket.

$$k = \frac{7.3 \cdot 10^{-5}}{0.167^2 \cdot 0.333^1 \cdot (6.7 \cdot 10^{-4})^1} = 11.73 \text{ M}^{-4}$$

Så  $y = 1$ ,  $z = 2$  og  $k = 11.73 \text{ M}^{-4}$