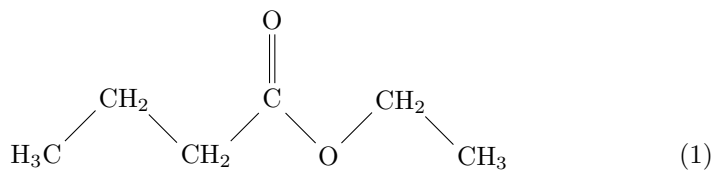
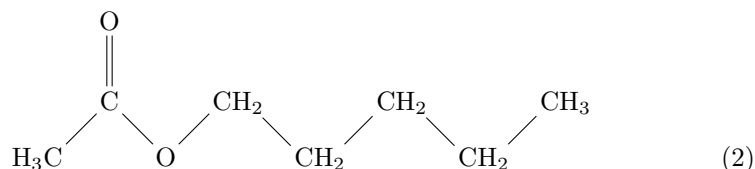


Kemi aflevering 1

Opgave 1



Figur 1: Dufter af ananas

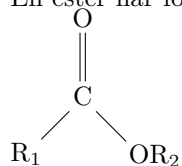


Figur 2: Dufter af banan

a. Anfør systematiske navne for de to estere

- Figur 1

En ester har formelen



Så R_1 i figur 1 ville være

butan: $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{C}$

Og R_2 ville være

ethan: CH_2-CH_3

Syren i esteren er altså butansyre og alkoholen er ethanol så figur 1 har det systematiske navn butansyreethylester

- Figur 2

Ligeledes er R_1 i figur 2

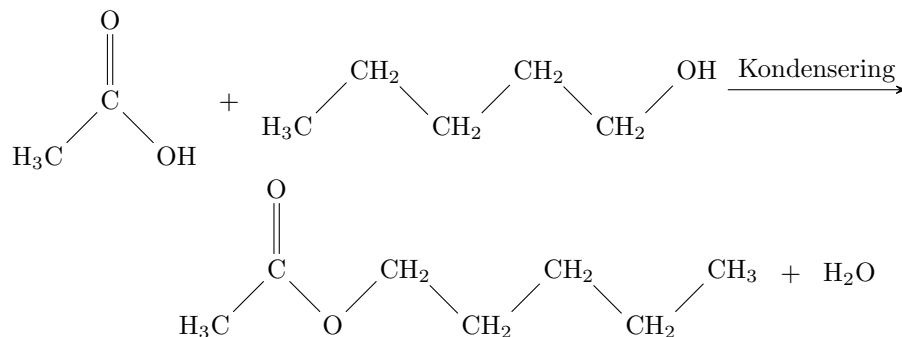
ethan: CH_3-C

Og R_2 ville være

pentan: $\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$

Syren i esteren er altså ethansyre og alkoholen er pentan-1-ol så figur 2 har det systematiske navn ethansyrepenntylester

Stof B(Figur 2) fremstilles ifølge nedenstående reaktionsskema

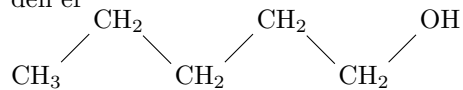


- b. Reaktionen danner esteren fra figur 2 og reaktionstypen er en kondensationsreaktion da der bliver dannet vand under reaktionen

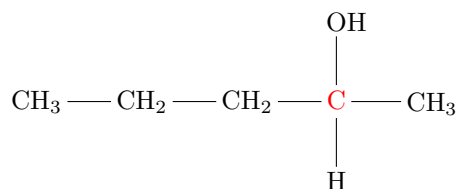
Der findes mange estere med formelen $\text{CH}_3\text{COOC}_5\text{H}_{11}$, hvoraf flere har frugtduft. Disse estere er isomere med stof B, og de kan dannes ud fra den samme carboxylsyres reaktion med forskellige alkoholer.

- c. Anfør strukturformler for to mulige alkoholer, der kan indgå i dannelsen af de nævnte estere. Den ene alkohol skal være primær og må ikke indeholde et asymmetrisk C-atom, mens den anden alkohol skal være sekundær og indeholde netop et asymmetrisk C-atom. Det asymmetriske C-atom skal markeres.

Den primære alkohol der kan indgå i dannelsen er den vi har i figur 2 så den er



Den anden kunne f.eks være



Hvor det røde carbon atom er det asymmetriske carbon atom

Andre estere dufter af blomster. Strukturen af en blomsterduftende ester, C, skal bestemmes ved hjælp af spektroskopi.

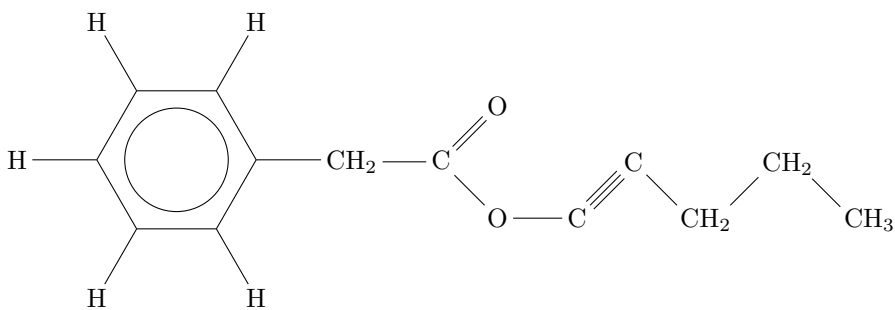
- d. Gør rede for karakteristiske absorptionsbånd over 1500 cm^{-1} i IR-spektret, idet du inddrager hybridisering.
 Forklar, hvilke bidrag IR-spektret giver til opklaringen af esterens struktur.
 ved cirka 1745 har vi det karakteristiske bånd for $\text{C}=\text{O}$ strækninger i estere
 ved omkring 3000 har vi de typiske $\text{C}-\text{H}$ strækninger

- e. Bestem strukturformlen for C. Argumenter ud fra integralkurve, kemiske skift og koblingsmønstre.

Signal	Aflæst skift	Areal	Opsplitning	Naboer
1	7.45	5	Singlet	0
2	5.1	2	Singlet	0
3	2.3	2	Triplet	2
4	1.6	2	Sekstet	5
5	0.95	3	Triplet	2

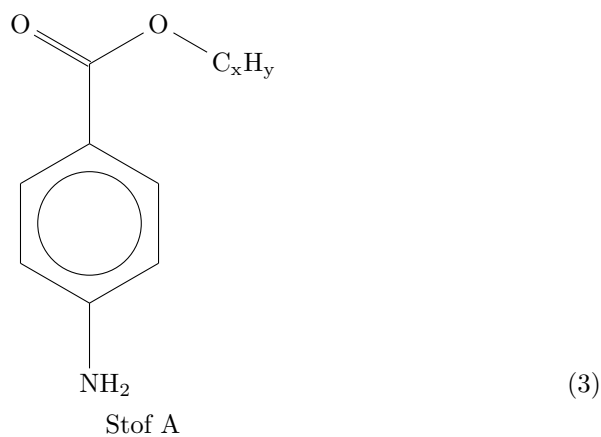
Signal	Tilordning	Tabel skift
1	Ar — H	6.5-8
2	— C — CH ₂ — Ar	2.6
3	— C — CH ₂ — C ≡ C	2.2
4	— C — CH ₂ — C — O — CO —	1.6
5	CH ₃ — C —	0.9

Grunden til at det kemiske skift fra tabelleng i signal 2 er så meget lavere end den aflæste er fordi i den aflæste binder carbonet direkte til esteren så den er ret tæt på en C=O og derfor har den lavere skærmning. Så mit gæt på strukturformlen er



Opgave 3

Stof A anvendes i solbeskyttende cremer. Stoffet kan absorbere solens ultraviolette stråler, som kan forårsage solskoldning og hudforandringer. Gruppen C_xH_y er en alkylgruppe.



- a. Karakteriser de funktionelle grupper i molekylet. Gør rede for, at stof A er en base.

Vi har en NH_2 gruppe hvilket er en primær amin

Vi har en aromatisk ring hvilket er en Phenyl

Vi har en estergruppe

Stoffet er en base fordi den primære amin gruppe kan optage en H^+ så den bliver

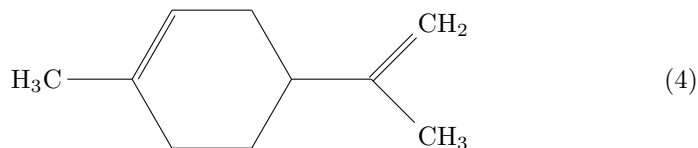
$\cdots \text{--- N}^+\text{H}_3$

- b. Gør rede for de karakteristiske absorptionsbånd over 1500 cm^{-1} i IR-spektret. Inddrag bølgetal og intensitet i tilordningen.

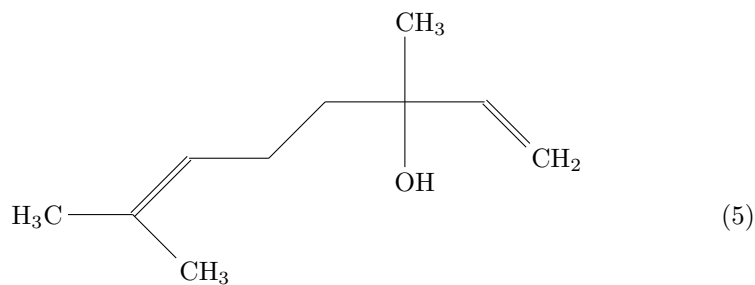
Bølgetal	Bemærkning	Tilordning
3300-3500	To brede bånd	N-H(primær amin)
2850-3000	flere toppe	C-H(C:sp^3)
1750	et kraftigt bånd	C=O(ester)
1600	et kraftigt bånd	N-H(primær amin)

Alle disse tilordninger giver mening i forhold til strukturformlen

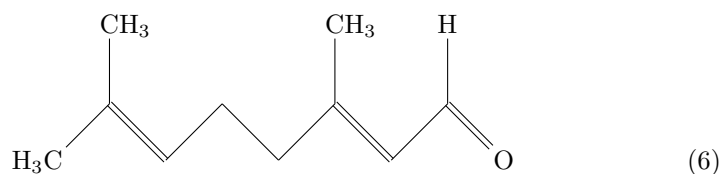
Opgave 5



Figur 4: Limonen



Figur 5: Linalool



Figur 6: Citral

a. Se figur 4

c. Argumenter for hvilket IR-spektrum, der hører til hvilket stof.

Det sidste spektrum hører til stoffet citral(figur 6) da citral er det eneste af de tre stoffer som er en aldehyd og derfor giver toppe ved 1745 - meget kraftig top
2720 Og 2820 - to toppe

Det andet spektrum hører til stoffet linalool(figur 5) da linalool er det eneste af de tre stoffer som indeholder en OH gruppe og derfor giver den en relativ bred top ved cirka 3600.

Så tilhører det første spektrum limonen(figur 4)

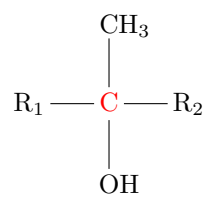
d. Hvor mange stereoisomere former findes der af hvert af de tre stoffer: limonen, linalool og citral?

- Limonen

Limonen har ikke nogle stereoisomere, den har kun en form

- Linalool

Linalool har 2 forskellige stereoisomere, da carbon atomet der ligger i midten af gruppen



er asymmetrisk

- Citral

Citral har heller ikke nogle stereoisomere, den har kun den ene form