

## Kemi aflevering 7

### Forsøg

I identifikationen af de tre stoffer startede vi ud med forsøg i laboratoriet på gymnasiet, som ville kunne give os en del tips i forhold til stoffernes aktive grupper.

1. Lugt test:

For hvert stof testede vi dets lugt. Vi ved at stoffer der lugter meget har en tendens til at indeholde flygtige stoffer, det vil sige stoffer der let fordampes. Vi ved også at stoffets lugt er relateret til hvor let det fordampes.

2. Udseende:

Hvert stof blev iagttaget for dets farve, gennemsigtighed og hvor tyktflydende det var. Vi ved at tyktflydende stoffer, generelt indeholder større molekyler end de lettere flydende stoffer.

3. Syre undersøgelse:

Stofferne blev testet for pH. Basiske stoffer er baser, og sure stoffer er syrer. Hvis vi ved om et stof er en base eller en syre, kan vi fastlægge et af dets egenskaber.

4. Hydrazin test:

I en hydrazin test bliver stofferne hver for sig tilsat hydrazin ( $\text{H}_2\text{NNH}_2$ ). Hvis stoffet undergår et farveskifte, er det fordi hydrazinen reagerer med enten en keton eller en aldehyd i stoffet. Dermed kan vi konkludere om der er en keton eller en aldehyd til stede i stoffet.

5. Fehlings test:

I en Fehlings test blandes de to væsker, Fehlings 1 ( $\text{CuSO}_4$ ,  $5 \text{H}_2\text{O}$ ) og Fehlings 2 ( $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6$ ,  $4 \text{H}_2\text{O}$ ), sammen med en smule af den væske, der skal testes. Hvis stoffet indeholder en aldehyd, vil et rødt bundfald af kobber observeres.

6. Brom test:

I en brom test, bliver en smule dibrom tilsat til væsken. Hvis der er en dobbelt eller triple binding mellem carbonatomer til stede i stoffet, vil dibrommen indgå i en substitutionsreaktion, med denne binding. Dibrom har en dyb orange farve, og vil miste dens farve, når den reagerer.

7. Beckmanns test:

Ved Beckmanns test, bliver det tilsat beckmanns blanding til stoffet. Beckmanns blanding ( $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ -(svovlsyre)) vil reagere med hydroxygruppen i en

primær alkohol, og omdanne denne til en aldehyd. Under denne reaktion vil et farveskifte, under sammenblandingen af væskerne, observeres.

#### 8. Titrering:

Ved en titrering tilsættes kontrollerede mængder af natriumhydroxid til en sur væske, som bliver konstant omrøret. I dette tilfælde måles pH af væsken samtidigt med at natriumhydroxiden bliver tilsat. Ud fra data fra titreringen kan den molare masse af syren bestemmes. Vi laver kun en titrering på stof 1, da det er den eneste syre.

For at kunne lave en endelig bestemmelse af stofferne, brugte vi Aalborg universitets H-NMR maskine, og deres IR-maskine for at fremstille H-NMR spektre og IR-spektre for alle tre stoffer.

## Databehandling

#### 1. Lugt test:

Stof 1: Lugtede ligesom salmiak. Ikke specielt kraftigt.

Stof 2: Lugtede sprittet. Rimeligt kraftigt

Stof 3: Lugtede som diesel. Meget kraftigt

Ud fra dette kan vi konkludere at stof 3 er et meget let flygtigt stof, som tyder på et lille molekyle og ingen polaritet, stof 2 kan vi også konkludere er rimeligt let flygtigt, men ikke nær så meget som stof 3.

#### 2. Udseende:

Stof 1: Sort og tyktflydende

Stof 2: Gennemsigtigt og lettere flydende

Stof 3: Gennemsigtigt og let flydende

Vi kan konkludere at stof 1 er et stort molekyle, da disse oftest er tyktflydende. Stof 2 og 3 var begge let flydende, dog var stof 3 lettest flydende. Dette understøtter konklusionerne fra lugt testen

#### 3. Syre undersøgelse:

Stof 1: pH på 1 (surt)

Stof 2: pH på 7 (neutralt)

Stof 3: pH på 7 (neutralt)

Dette viser at stof 1 er en syre, hvor imod stof 2 og 3 er hverken sure eller basiske. Dette understøtter igen de ovenstående konklusioner.

#### 4. Hydrazin test:

Stof 1: Blev klarere

Stof 2: Ingen reaktion

Stof 3: Ingen reaktion

Dette viser at stof 1 indeholder enten en aldehyd eller en keton, og at stof 2 og 3 ikke indeholder nogen af dem.

## 5. Fehlings test:

Stof 1: Aldehyd

Stof 2: Blev ikke testet pga. hydrazin testen

Stof 3: Blev ikke testet pga. hydrazin testen

Dermed har vi fastlagt at stof 1 indeholder en aldehyd.

## 6. Brom test:

Stof 1: Ingen reaktion

Stof 2: Dobbelt binding

Stof 3: Dobbelt binding

Dette viser at stof 1, ikke indeholder en dobbelt eller triple binding mellem carbon atomer. Derimod reagerede både stof 2 og 3, som viser at de begge har enten dobbelt eller trippelt binding mellem carbonatomer i sig. Der var en hurtigere reaktion mellem stof 3, hvilket vi forklarer i, at stof 3 er mere flydende, og derfor har bedre blandings egenskaber.

## 7. Beckmanns test:

Stof 1: Blandbar

Stof 2: Alkohol

Stof 3: Ikke blandbar

Da stof 2 reagerede med Beckmann blandingen ved vi at denne er en alkohol. Stof 1 blandede sig med beckmann blandingen hvor imod stof 3 ikke gjorde. Beckmann blandingen er meget polært, så ud fra deres blandbarhed, kan vi konkludere at stof 1 er polært og stof 3 er upolært.

## 8. Titrering:

Stof 1 er den eneste der bliver titreret, fordi at vi ud fra pH testen ved at denne er den eneste der er sur. Stof 1 bliver fortyndet 0.151 g opblandet i 50 mL vand, som så bliver titreret med natriumhydroxid.

(Indsæt tabellen over værdierne)

Forholdet mellem opblandingsens pH værdi, og mængden af den tilsatte natriumhydroxid plottes.

På grafen ser vi en pludselig stigning i pH værdien. Halvvejs i denne stigning er hvor syrens ækvivalenspunkt med natriumhydroxiden rammes. Da vi ikke på grafen kan aflæse dette præcist tager vi gennemsnittet af de to punkter, som ligner at være i midten af denne stigning.

Når vi kender mængden af natriumhydroxid der er tilsat i ækvivalenspunktet kan vi bestemme syrens molare masse. Den molare masse vil selvfølgelig afhænge af om syren er monohydron eller ej, som udgangspunkt antager vi at den er monohydron, og finder den molare masse ud fra den antagelse. Da den en syre med en hydron vil reagere med natriumhydroxiden i et 1:1 forhold, vil stofmængden af syren i opløsningen være givet ved stofmængden af den tilsatte natriumhydroxid i ækvivalenspunktet. Det vil sige at vi

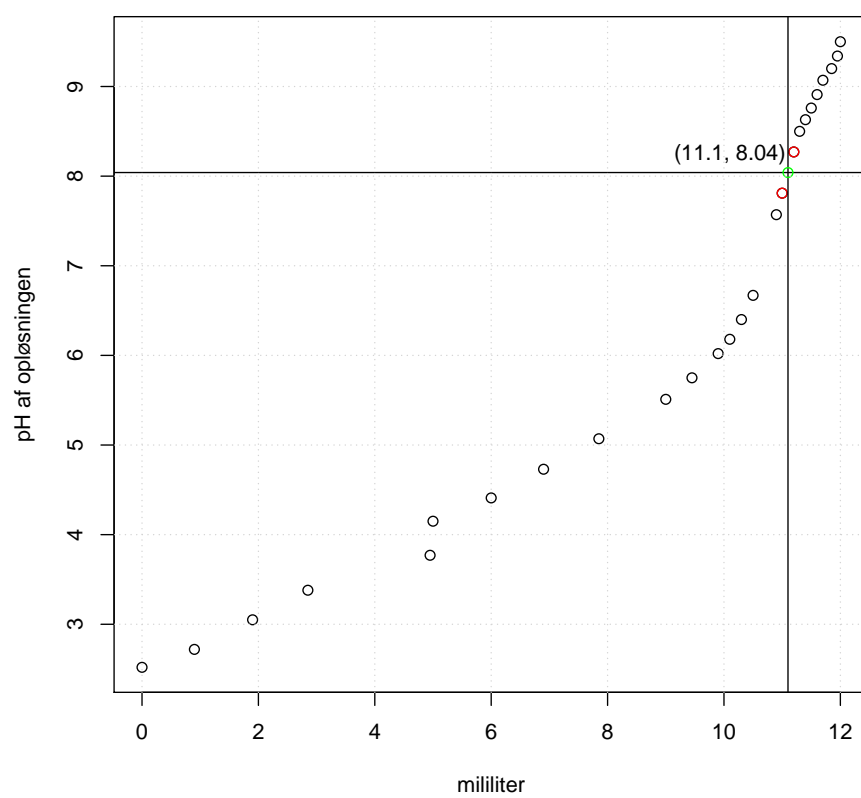


Figure 1: Titring

kan finde syrens stof mængde, og da vi kender den tilsatte masse, kan vi også finde dens molare masse.

$$m(\text{Stof1}) = 0.151 \text{ g}$$

$$c(\text{NaOH}) = 0.1 \text{ M}$$

$$V(\text{NaOH}) = 11.1 \text{ mL}$$

$$n(\text{NaOH}) = c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH})$$

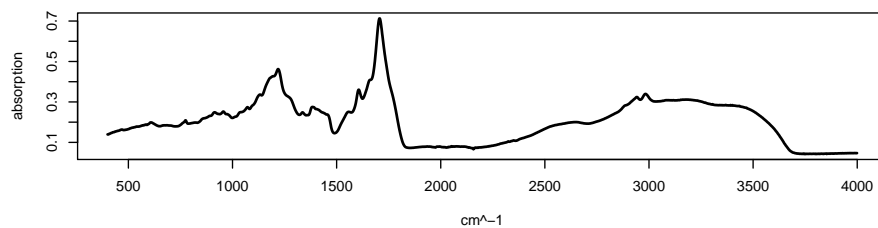
$$n(\text{Stof1}) = n(\text{NaOH})$$

$$M(\text{Stof1}) = \frac{m(\text{Stof1})}{n(\text{Stof1})} = \frac{m(\text{Stof1})}{n(\text{NaOH})} = \frac{m(\text{Stof1})}{c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH})} = 136 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

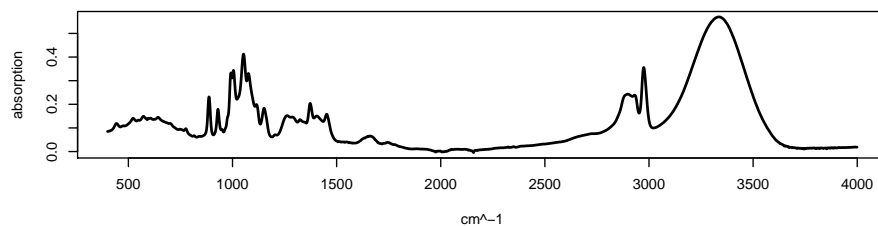
## Databehandling for forsøget ved Aalborg universitet

## IR

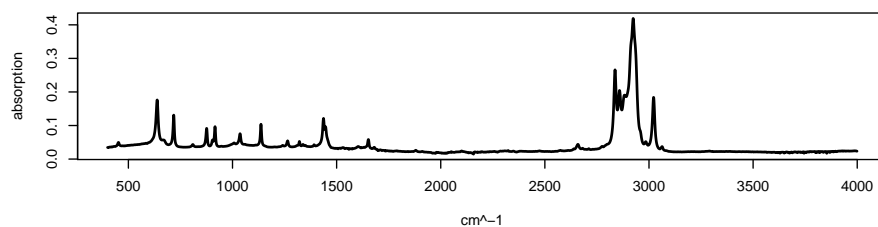
Stof 1



Stof 2



Stof 3



Stof 1	$cm^{-1}$ (Aflest)	Intensitet	Tilordning	Kommentarer	$cm^{-1}$ (Tabel)
1	1490-1627	Mellem	C=O	Carboxylsyre	Ca. 1695
2	1490-1840	Stærk	C=O	Aldehyd	Ca. 1730
3	2200-3690	Mellem	O-H	Carboxylsyre	2500-3500

Stof 2	$cm^{-1}$ (Aflest)	Intensitet	Tilordning	Kommentarer	$cm^{-1}$ (Tabel)
1	2770-2950	Svag/Mellem	C-H( $C : sp^3$ )		2810-2960
2	2950-3000	Svag/Mellem	C-H( $C : sp^2$ )	Dobbeltbinding	3010-3100
3	3000-3600	Mellem	O-H	Alkohol	3100-3600

Stof 3	$cm^{-1}$ (Aflæst)	Intensitet	Tilordning	Kommentarer	$cm^{-1}$ (Tabel)
1	2825-2950	Svag/Mellem	C-H	(C : $sp^3$ )	2810-2960
2	3010-3040	Svag	C-H	(C : $sp^2$ )	3010-3100

## HNMR

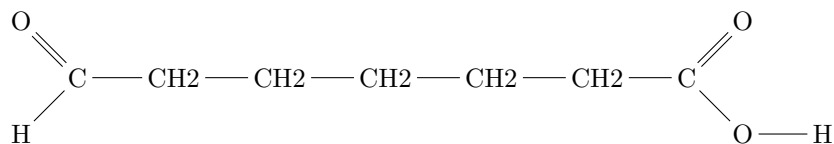
## Konklusion

### Stof 1

Ud fra dens konsistens ved vi at det er et meget langt molekyle. pH fortæller os at det indeholder en syregruppe, som bliver understøttet af IR-spektret, hvor vi finder at molekylet indeholder en carboxylsyregruppe. IR-spektret viser også at det er en aldehyd, som bliver genbekræftet af Fehlings Testen. Desuden ved vi at stoffet er polært. For at vi kan have både en aldehyd og en carboxylsyregruppe i det samme molekyle, må de have hver deres ende af en carbonkæde, og da vi ved at stoffet er polært skal oxygen atomerne for begge grupper være langt nok væk til at de ikke har effekt på hinanden. Hvis vi tager den molare masse af molekylet, fjerner de 36 g/mol, for de to oxygenatomer vi ved det indeholder, og dividerer det med 12, har vi cirka hvor mange carbon atomer molekylet skal indeholde, så må der fyldes på med hydrogen de andre steder, fordi vi ikke har tegn på andre funktionelle grupper i molekylet. Ved at sætte hydrogen på atomet kommer den molare masse ikke til at passe ordentligt, men dette må være måle usikkerheder ved titreringen.

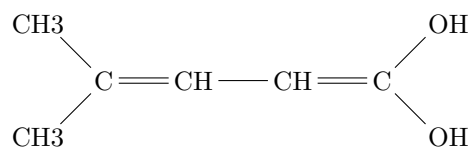
$$\text{Antalcarbon} = \frac{136 - 18 \cdot 2}{12} \approx 8$$

Med denne information er det tætteste vi kan komme på en bestemmelse af molekylet være:



### Stof 2

Forsøgene i vores laboratorie har ikke givet specielt meget information omkring stof 2, dog har vi fundet ud af at det er en alkohol, gennem Beckmanns testen, og vi ved at den indeholder en dobbelt binding, gennem brom testen. I denne hensigt fortalte IR-spektret ikke noget nyt om stoffet. H-NMR spektret har nogle relativt store udsving mellem de aflæste og de målte kemiske skift, men med disse tilordninger har vi fundet en strukturformel, som passer med den information, som vi har åbenbaret gennem vores andre test, nemlig denne:



Stof 3

Forsøgene i vores laboratorium har heller ikke givet specielt meget information omkring stof 3, at den indeholder en dobbeltbinding, gennem brom testen, og vi ved at den er upolær, da den ikke ville blandes med hydrazin. IR-spektret har ikke givet os så meget yderligere information, andet end at bekræfte vores mistanker om at dette molekyle ikke indeholder nogle funktionelle grupper, men blot består af bindinger mellem carbonatomer og hydrogenatomer.

Vi kunne ikke finde en strukterformel der gav mening i forhold til IR- og HNMR-spektrumme, idet vi ved at den kun indeholder C-atomer og H-atomer.