

Opgavesæt 8  
**3.b kemi A**

Kevin Zhou

3. april 2025

**Note:**

Databog fysik kemi (2007) er benyttet ved beregningerne.

## Opgave 1: Et middel til behandling af bipolare lidelser

### Løsning:

a. Massen af valproinsyre i opløsningen må være

$$\begin{aligned} m(\text{valproinsyre}) &= M(\text{valproinsyre}) \cdot n(\text{valproinsyre}) \\ &= M(\text{valproinsyre}) \cdot c(\text{valproinsyre}) \cdot V \\ &= 144,21 \text{ g/mol} \cdot 0,0090 \text{ M} \cdot 0,100 \text{ L} \\ &\approx 0,13 \text{ g} \end{aligned}$$

Massen af valproinsyre i opløsningen er altså 0,13 g.

b. Siden valproinsyre er svag, så har vi

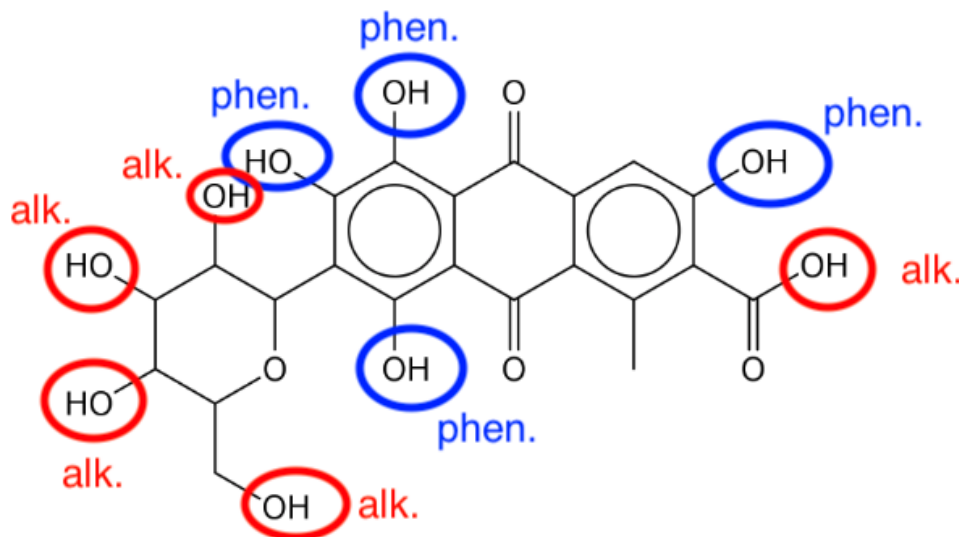
$$\begin{aligned} pH &= \frac{pK_s - \log\left(\frac{c_s}{M}\right)}{2} \\ &= \frac{4,8 - \log\left(\frac{0,0090 \text{ M}}{M}\right)}{2} \\ &\approx 3,4 \end{aligned}$$

I den vandige opløsning af valproinsyre har vi altså  $pH = 3,4$ .

## Opgave 3: Cochenille - et farvestof udvundet af lus

### Løsning:

a. Hydroxygrupper bundet til et C-atom i en aromatisk ring tilhører stoffklassen phenoler, og hydroxygrupper bundet til et alifatisk eller alicyklisk C-atom tilhører stoffklassen alkoholer. Dette er angivet for hver hydroxygruppe i strukturen for carminsyre i fig. 1 (de blå tilhører stoffklassen phenoler, og de røde tilhører stoffklassen alkoholer).



Figur 1: Hydroxygrupperne markeret i strukturen for carminsyre

b. Vi finder et udtryk for den molare absorptionskoefficient ud fra Lambert-Beers lov.

$$A = \varepsilon_{\lambda} \cdot l \cdot [\text{carmin}] \iff \varepsilon_{\lambda} = \frac{A}{l \cdot [\text{carmin}]}$$

Fra Excelfilen har vi, at når bølgelængden er  $\lambda = 515 \text{ nm}$ , så er absorbansen  $A = 0,811$ . Vi indsætter da de kendte værdier og udregner den molare absorptionskoefficient.

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\lambda} &= \frac{A}{l \cdot [\text{carmin}]} \\ &= \frac{0,811}{1,00 \text{ cm} \cdot 1,00 \cdot 10^{-4} \text{ M}} \\ &\approx 8,11 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1} \end{aligned}$$

Den molare absorptionskoefficient for carmin ved bølgelængden 515 nm er altså  $\varepsilon_{\lambda} = 8,11 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ .

c. Fra Lambert-Beers lov har vi, at

$$A = \varepsilon_{\lambda} \cdot l \cdot [\text{carmin}] \iff [\text{carmin}] = \frac{A}{l \cdot \varepsilon_{\lambda}}$$

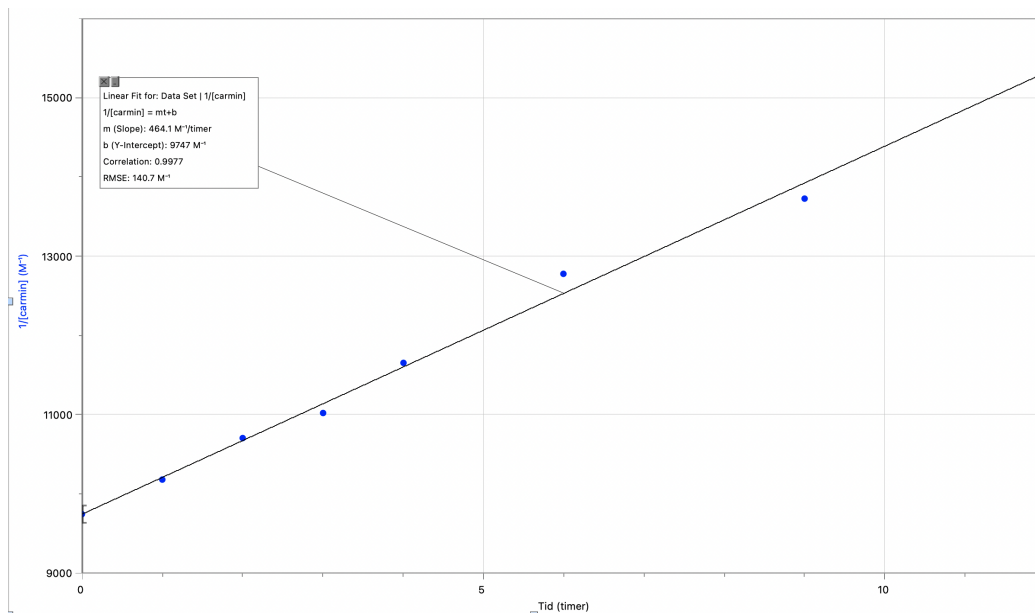
Hvis reaktionen er af 2. orden mht. carmin, så må der gælde, at

$$\frac{1}{[\text{carmin}]} = k \cdot t + \frac{1}{[\text{carmin}]_0}$$

Altså må  $(t, \frac{1}{[\text{carmin}]})$ -grafen være en ret linje med hældningskoefficienten  $k$ , hvis reaktionen er af 2. orden mht. carmin. Imidlertid har vi, at

$$\begin{aligned} \frac{1}{[\text{carmin}]} &= \frac{\varepsilon_{\lambda} \cdot l}{A} \\ &= \frac{1,00 \text{ cm} \cdot 8110 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}}{A} \\ &= \frac{8110 \text{ M}^{-1}}{A} \end{aligned}$$

Vi laver da lineær regression på punkterne i  $(t, \frac{1}{[\text{carmin}]})$ -grafen, hvilket ses i fig. 2.



Figur 2: Lineær regression på  $(t, \frac{1}{[\text{carmin}]})$ -grafen for reaktionen

Vi ser, at punkterne tilnærmelsesvist følger den lineære sammenhæng. Det vil sige, at nedbrydningen af carmin kan beskrives som en 2. ordens reaktion med hensyn til carmin.

Fra den lineære regression har vi, at funktionsudtrykket for nedbrydningen må være

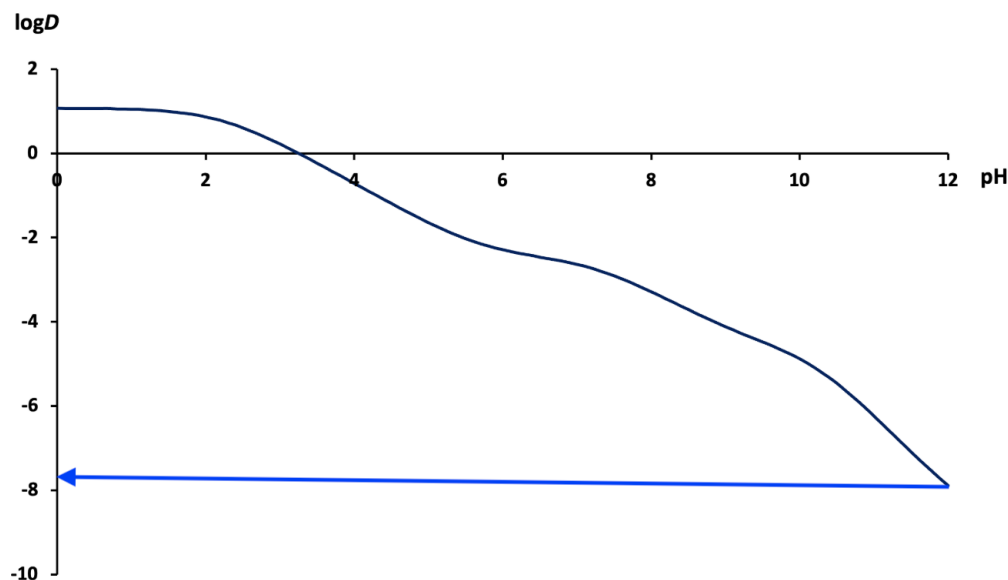
$$\frac{1}{[\text{carmin}]} = 464 \text{ M}^{-1} \cdot \text{h}^{-1} + 9,75 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1}$$

hvor  $h$  er enheden timer.

d. Der gælder, at fasen med octan-1-ol er upolær, hvor fasen med vand er polær.

Det er klart, at carminsyre i den neutrale form er den mindst polære. For jo flere hydroner carminsyre afgiver, desto mere negativ og dermed mere polær bliver den så. Med andre ord, har vi, at når pH vokser, så bliver carminsyre mere polær. Altså bliver opløseligheden i vand større, når pH vokser. Tilsvarende bliver opløseligheden i octan-1-ol mindre, når pH vokser.

Således må  $D$  og derfor  $\log(D)$  aftage, når pH vokser. Dette understøttes af figuren (se fig. 3), hvor  $\log(D)$  er aftagende i hele intervallet. For at sætte nogle værdier på, har vi, at  $\log(D) = 1,1$  ved  $\text{pH} = 0$ , og  $\log(D) = -7,8$  ved  $\text{pH} = 12$ . De fire "knæk" i grafen skyldes carminsyres evne til at afgive fire hydroner. Bemærk, at disse knæk forekommer, hvor pH er omkring de givne  $\text{pK}_s$ -værdier.



Figur 3:  $(\text{pH}, \log(D))$ -graf for carminsyre

## Opgave 4: Iridium(IV)oxid - i højteknologiske materialer

### Løsning:

a. Vi beregner stofmængden af dioxygen i beholderen med idealgasloven.

$$\begin{aligned} n(\text{O}_2) &= \frac{p(\text{O}_2) \cdot V}{R \cdot T} \\ &= \frac{1,00 \text{ bar} \cdot 2,00 \text{ L}}{0,0831 \frac{\text{L} \cdot \text{bar}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 1325 \text{ K}} \\ &\approx 0,0182 \text{ mol} \end{aligned}$$

Stofmængden af dioxygen i beholderen er altså  $n(\text{O}_2) = 0,0182 \text{ mol}$ .

b. Vi starter med at opskrive ligevægtsloven for at bestemme ligevægtskonstantens enhed.

$$K = \frac{1}{p(\text{O}_2)}$$

3

Det fremgår af ligevægtsloven, at enheden for  $K$  må være  $\text{bar}^{-1}$ .

Fra figuren i opgavebeskrivelsen har vi, at

$$\ln(K \cdot \text{bar}) = 32968 \text{ K} \cdot \frac{1}{T} - 22,813 \iff K = e^{32968 \text{ K} \cdot \frac{1}{T} - 22,813} \text{ bar}^{-1}$$

Ligevægtskonstanten ved 1200 K må da være

$$K = e^{32968 \text{ K} \cdot \frac{1}{1200 \text{ K}} - 22,813} \text{ bar}^{-1} \\ \approx 105,7 \text{ bar}^{-1}$$

Ligevægtskonstanten ved 1200 K er altså  $K = 105,7 \text{ bar}^{-1}$ .

c. Fra van't Hoffs ligning har vi

$$\ln(K) = -\frac{\Delta H^\circ}{R} \cdot \frac{1}{T} + \frac{\Delta S^\circ}{R},$$

og fra figuren har vi

$$\ln(K) = 32968 \text{ K} \cdot \frac{1}{T} - 22,813.$$

Ved kombination af ligningerne får vi

$$-\frac{\Delta H^\circ}{R} = 32968 \text{ K} \iff \Delta H^\circ = -R \cdot 32968 \text{ K}.$$

Vi får ligeledes

$$\frac{\Delta S^\circ}{R} = -22,813 \iff \Delta S^\circ = -R \cdot 22,813$$

Vi udregner disse størrelser.

$$\Delta H^\circ = -8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 32968 \text{ K} \approx -2,7410 \cdot 10^5 \text{ J/mol} \\ \Delta S^\circ = -8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 22,813 \approx -189,67 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

Der gælder, at en reaktion er spontan præcis når

$$\Delta G < 0.$$

Vi vil nu kontrollere, om det er tilfældet for reaktionen til tidspunktet  $t_{\text{målt}}$ :

$$\begin{aligned} \Delta G &= \Delta G^\circ + R \cdot T \cdot \ln(Y) \\ &= -R \cdot T \cdot \ln(K) + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{1}{p(\text{O}_2)}\right) \\ &= R \cdot T \cdot \left(\ln\left(\frac{1}{p(\text{O}_2)}\right) - \ln(K)\right) \\ &= R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{1}{p(\text{O}_2) \cdot K}\right) \\ &= 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 1200 \text{ K} \cdot \ln\left(\frac{1}{0,15 \text{ bar} \cdot 105,7 \text{ bar}^{-1}}\right) \\ &\approx -2,757 \cdot 10^4 \text{ J/mol} < 0 \end{aligned}$$

Siden  $\Delta G < 0$  til tidspunktet  $t_{\text{målt}}$ , så må reaktionen altså være spontan.

d. Når ligevægten har indstillet sig, så må reaktionsbrøken være lig ligevægtskonstanten.

$$K = \frac{1}{p(\text{O}_2)} \iff p(\text{O}_2) = \frac{1}{K}$$

Vi udregner nu  $p(\text{O}_2)$ .

$$p(\text{O}_2) = \frac{1}{7,91 \text{ bar}^{-1}} \\ \approx 0,126 \text{ bar}$$

Siden der ikke var noget iridium(IV)oxid i beholderen til start, så har vi

$$n(\text{IrO}_2) = -\Delta n(\text{O}_2) \iff m(\text{IrO}_2) = -M(\text{IrO}_2) \cdot \left( \frac{p_{\text{slut}}(\text{O}_2) \cdot V}{R \cdot T_{\text{slut}}} - \frac{p_{\text{start}}(\text{O}_2) \cdot V}{R \cdot T_{\text{start}}} \right) \\ \implies m(\text{IrO}_2) = -M(\text{IrO}_2) \cdot \frac{(p_{\text{slut}}(\text{O}_2) - p_{\text{start}}(\text{O}_2)) \cdot V}{R \cdot T}$$

Bemærk, at vi her har  $T = T_{\text{start}} = T_{\text{slut}}$ . Vi udregner nu  $m(\text{IrO}_2)$ .

$$m(\text{IrO}_2) = -M(\text{IrO}_2) \cdot \frac{(p_{\text{slut}}(\text{O}_2) - p_{\text{start}}(\text{O}_2)) \cdot V}{R \cdot T} \\ = -(192,2 \text{ g/mol} + 2 \cdot 16,00 \text{ g/mol}) \cdot \frac{(0,12642 \text{ bar} - 1,00 \text{ bar}) \cdot 2,00 \text{ L}}{0,0831 \frac{\text{L} \cdot \text{bar}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 1325 \text{ K}} \\ \approx 3,56 \text{ g}$$

Massen af iridium(IV)oxid i beholderen ved ligevægt er altså  $m(\text{IrO}_2) = 3,56 \text{ g}$ .