

Opgavesæt 9
3.b kemi A

Kevin Zhou

24. april 2025

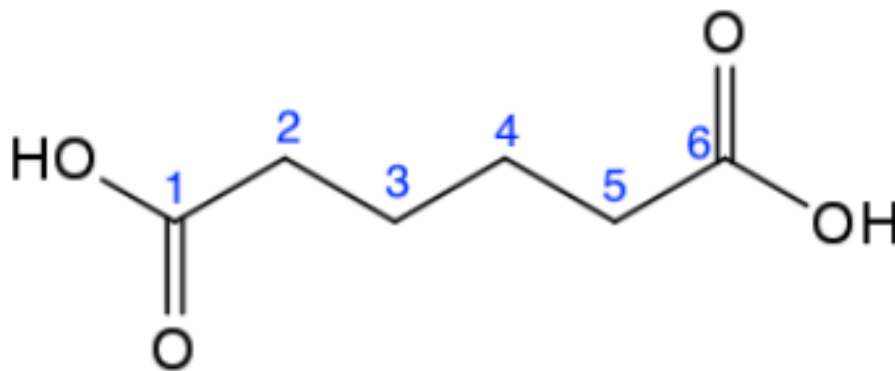
Note:

Databog fysik kemi (2007) er benyttet ved beregningerne.

Opgave 1: Adipinsyre

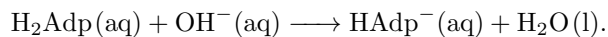
Løsning:

a. Siden de to carboxylsyregrupper er de funktionelle grupper med højst prioritering, skal navnet ende på -disyre. Derudover indeholder den længste kæde af C-atomer netop seks C-atomer, og hexan må da være i navnet (se fig. 1). Da der kun er én mulighed for, hvor de to syregrupper kan sidde, så behøver vi ikke angive nummeret på C-atomerne, hvorpå de sidder. Det systematiske navn for adipinsyre bliver således hexandisyre.

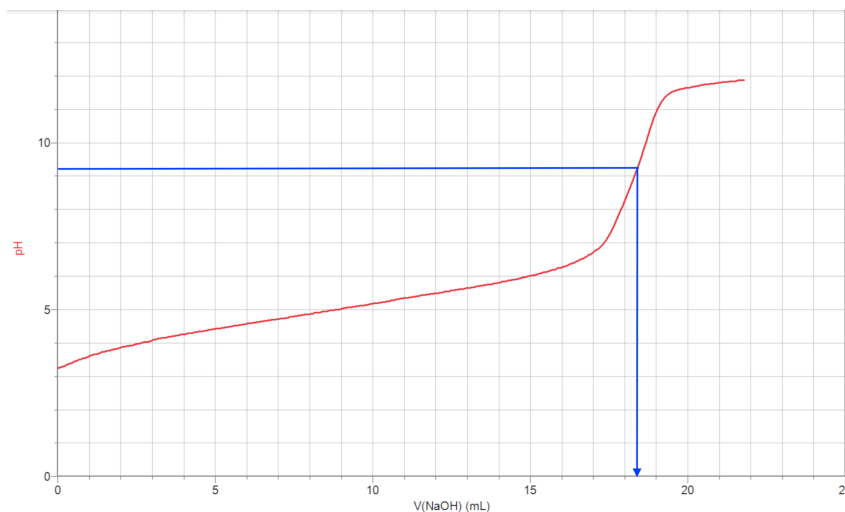


Figur 1: Navngivning af adipinsyre

b. Lad H_2Adp betegne adipinsyre. Så må titreringsreaktionen fra start til første ækvivalenspunkt (bemærk, at adipinsyre er dihydron) så være



Det ses, at reaktionsforholdet mellem NaOH og adipinsyre er 1:1.



Figur 2: Aflæsning på titrerkurven

Ved det første ækvivalenspunkt må der gælde, at $n(\text{H}_2\text{Adp}) = n(\text{NaOH})$, hvor $n(\text{H}_2\text{Adp})$ er stofmængden af adipinsyre i den oprindelige mættede opløsning. Vi aflæser på titrerkurven (se fig. 2), at det tilsatte volumen NaOH-opløsning ved første ækvivalenspunkt er $V(\text{NaOH}) = 18,4 \text{ mL}$. Da vi fra videoen har, at stofmængdekonzentrationen af NaOH-opløsningen er $c(\text{NaOH}) = 0,0891 \text{ M}$ og volumen af den mættede opløsning er $V(\text{adipinsyre}) = 5,00 \text{ mL}$, så kan vi udregne $c(\text{H}_2\text{Adp})$.

$$\begin{aligned} c(\text{H}_2\text{Adp}) &= \frac{n(\text{H}_2\text{Adp})}{V(\text{H}_2\text{Adp})} \\ &= \frac{c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH})}{V(\text{H}_2\text{Adp})} \\ &= \frac{0,0891 \text{ M} \cdot 18,4 \text{ mL}}{5,00 \text{ mL}} \\ &\approx 0,328 \text{ M} \end{aligned}$$

Stofmængdekonzentrationen af adipinsyre i den mættede opløsning er altså $c(\text{H}_2\text{Adp}) = 0,329 \text{ M}$.

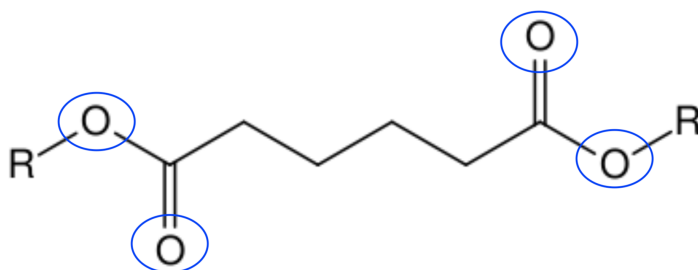
c. For at bestemme molekylformlen for esteren, finder vi først den empiriske formel. Fra elementaranalysen har vi, at der i 100 g af stoffet må være

$$\begin{aligned} n(\text{C}) &= \frac{65,09 \text{ g}}{12,01 \text{ g/mol}} = 5,4197 \text{ mol} \\ n(\text{H}) &= \frac{10,14 \text{ g}}{1,008 \text{ g/mol}} = 10,0595 \text{ mol} \\ n(\text{O}) &= \frac{24,77 \text{ g}}{16,00 \text{ g/mol}} = 1,5481 \text{ mol} \end{aligned}$$

Vi beregner nu stofmængdeforholdene.

$$\begin{aligned} \frac{n(\text{C})}{n(\text{O})} &= \frac{5,4197 \text{ mol}}{1,5481 \text{ mol}} = 3,5008 \approx 3,5 \\ \frac{n(\text{H})}{n(\text{O})} &= \frac{10,0595 \text{ mol}}{1,5481 \text{ mol}} = 6,4979 \approx 6,5 \end{aligned}$$

Forholdet mellem stofmængderne af C, H og O er altså med stor nøjagtighed 7:13:2. Esterens empiriske formel må da være $\text{C}_7\text{H}_{13}\text{O}_2$. Imidlertid har vi fra esterens strukturformel (se fig. 3), at esteren netop indeholder fire O-atomer (for R betegner alkylgrupper). Vi ganger da den empiriske formel op med 2, og får, at molekylformlen for esteren må være $\text{C}_{14}\text{H}_{26}\text{O}_4$.



Figur 3: Esteren indeholder netop fire O-atomer

d. Vi betragter ^1H -NMR-spektret for alkoholen. En opsummerende tabel ses i tabel 1.

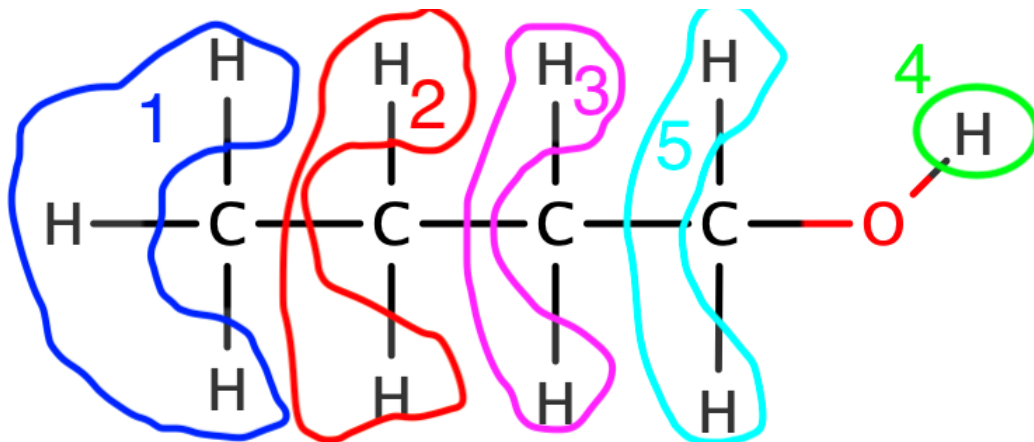
Signal nr.	Kemisk skift (aflæst) δ/ppm	Integral/areal (relativt antal ækvivalente ^1H -atomer)	Opsplitning	Antal nabo- ^1H 'er	Tilordning	Kemisk skift (tabel) δ/ppm
1	0,93	3	Triplet	2	CH_3-CH_2	0,9
2	1,39	2	Sekstet	5	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	1,3
3	1,53	2	Kvintet	4	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$	1,5
4	2,24	1	Singlet	0	$-\text{OH}$	0,5-5
5	3,62	2	Triplet	2	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$	3,5

Tabel 1: Tilordning af absorptionsbånd i ^1H -NMR-spektret

Der er fem signaler i spektret, hvilket betyder, at der er fem forskellige grupper af ækvivalente ^1H -kerner. Siden R er en alkylgruppe, så fremgår det klart fra arealerne af signal nr. 1, 2, 3 og 5, at alkoholen indeholder én CH_3 -gruppe og tre CH_2 -grupper. Signal nr. 4 kan tilordnes OH -gruppen.

Fra opsplitningerne har vi så, at ^1H -kernerne hørende til signal 1 må koble til de to ^1H -kerner hørende til signal 2. Derudover fremgår det også fra opsplitningerne samt kemiske skift, at ^1H -kernerne hørende til signal nr. 5 må koble til ^1H -kernen hørende til hydroxy-gruppen i signal nr. 4 samt ^1H -kernerne hørende til signal nr. 3. Til sidst må ^1H -kernerne hørende til signal 3 både koble til ^1H -kernerne hørende til signal nr. 5 og dem, der hører til signal nr. 2.

Altså vil det sige, at vi har CH_3 -gruppen bundet til en CH_2 -gruppe, der er bundet til en CH_2 -gruppe, der er bundet til endnu en CH_2 -gruppe, der er bundet til OH -gruppen. Strukturformlen for alkoholen ses i fig. 4, hvor ^1H -kernerne, der svarer til hvert signal er nummereret.

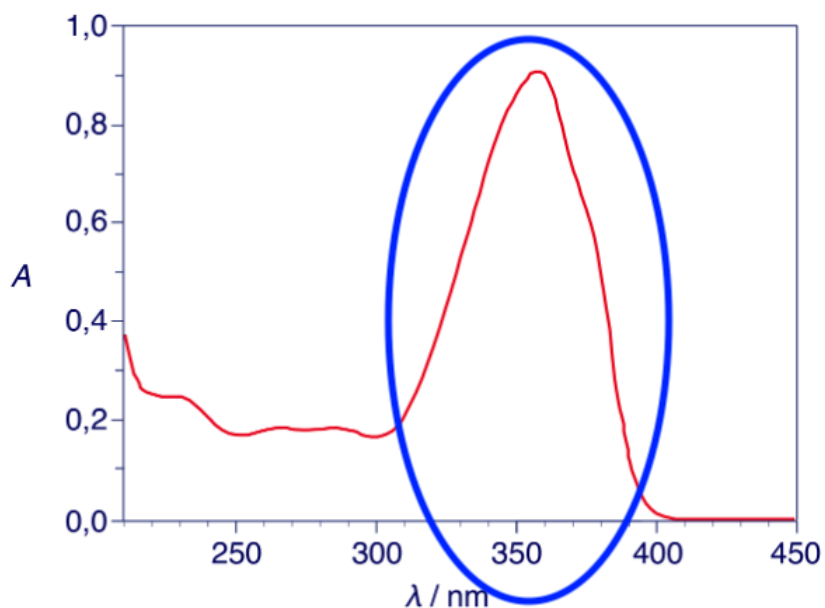


Figur 4: Strukturen for R-OH

Opgave 2: Avobenzon - et kemisk filter i solcreme

Løsning:

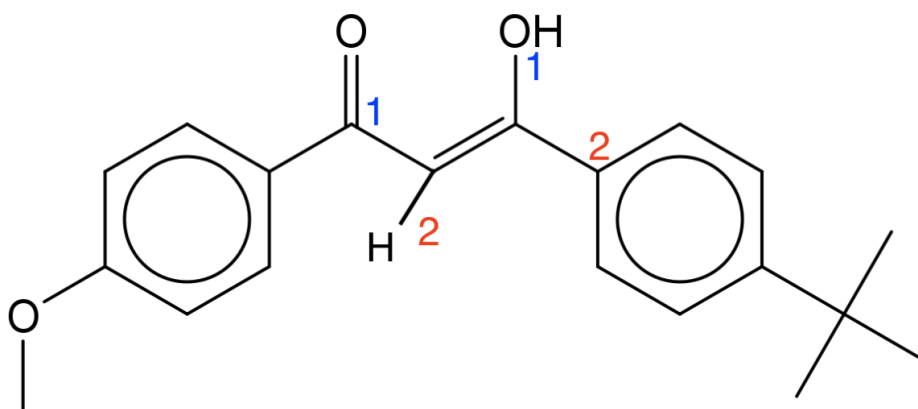
a. Vi ser fra absorptionsspektret (fig. 5), at absorptionen er størst i området 330 nm til 380 nm, hvilket ligger indenfor området af UV-A. Altså beskytter avobenzon især mod ultraviolet stråling fra solen i form af UV-A.



Figur 5: Absorptionsspektrum

b. Avobenzon B kan udvise stereoisomeri, da der ikke er omdrejningsfrihed ved dobbeltbindingen (se fig. 6), og der sidder fire distinkte grupper på de to C-atomer, hvorimellem dobbeltbindingen sidder.

Vi ser nu på prioriteringerne af substituenterne på C-atomerne, hvorimellem dobbeltbindingen sidder. Grupperne med højst prioritet er markeret med 1 i fig. 6, og de laveste med 2. Det ses, at grupperne med højst prioritet sidder på samme side af dobbeltbindingen, hvilket vil sige, at der er tale om Z-formen.



avobenzon B

Figur 6: Avobenzon B kan udvise stereoisomeri

c.