

Opgavesæt 9
3.b kemi A

Kevin Zhou

24. april 2025

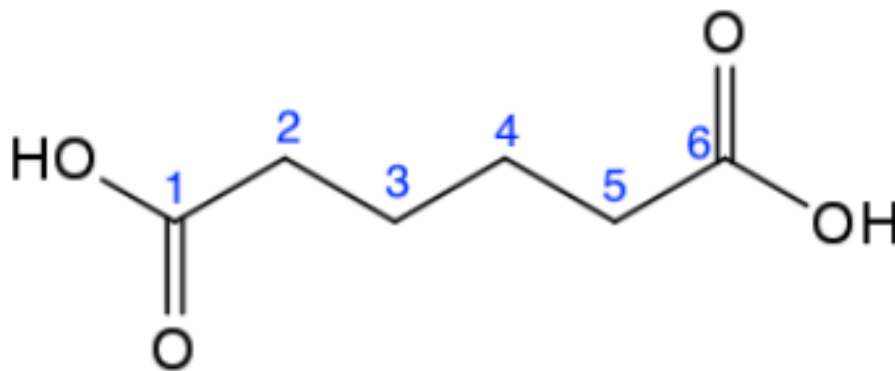
Note:

Databog fysik kemi (2007) er benyttet ved beregningerne.

Opgave 1: Adipinsyre

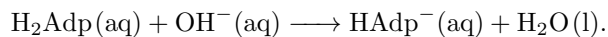
Løsning:

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.

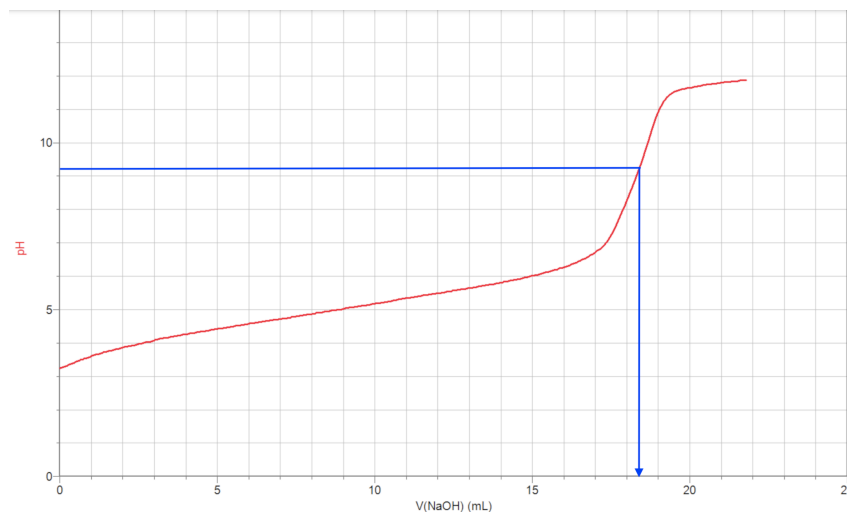


Figur 1: Navngivning af adipinsyre

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 $c(\text{H}_2\text{Adp}) = 0,329 \text{ M}$.

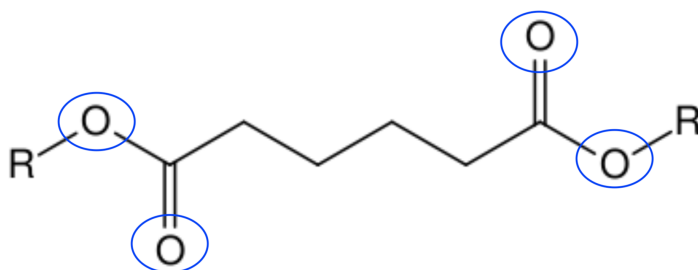
c. For at bestemme molekylformlen for esteren, finder vi først den empiriske formel. Fra elementaranalysen har vi, at der i 100 g af stoffet må være

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

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.

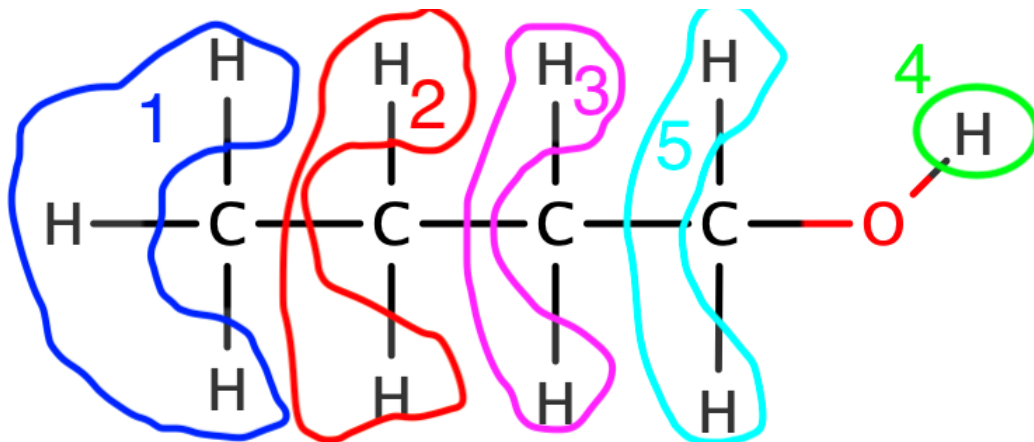
Signal nr.	Kemisk skift (aflæst) δ /ppm	Integral/areal (relativt antal ækvivalente ^1H -atomer)	Opsplitning	Antal nabo- ^1H 'er	Tilordning	Kemisk skift (tabel) δ /ppm
1	0,93	3	Triplet	2	CH_3-CH_2	0,9
2	1,39	2	Sekstet	5	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$	1,3
3	1,53	2	Kvintet	4	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$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

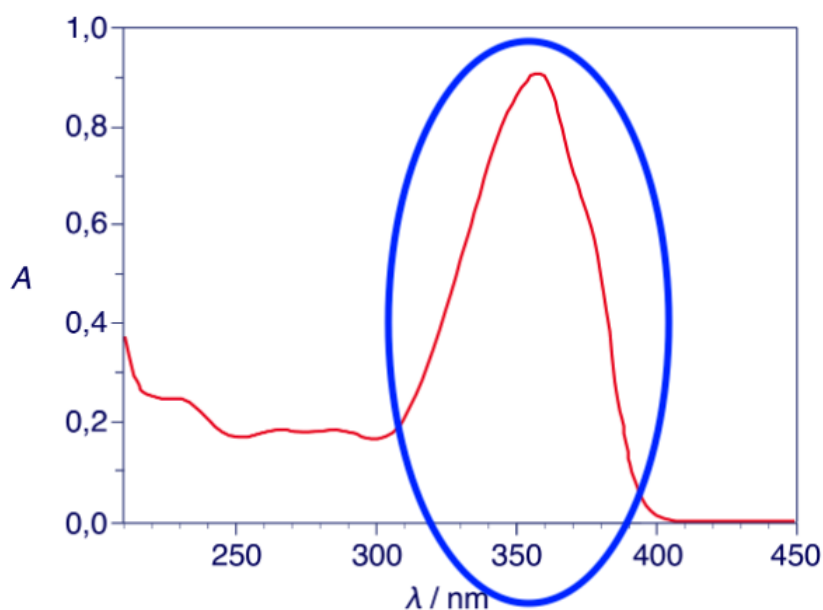


Figur 4: Strukturen for R-OH

Opgave 2: Avobenzon - et kemisk filter i solcreme

Løsning:

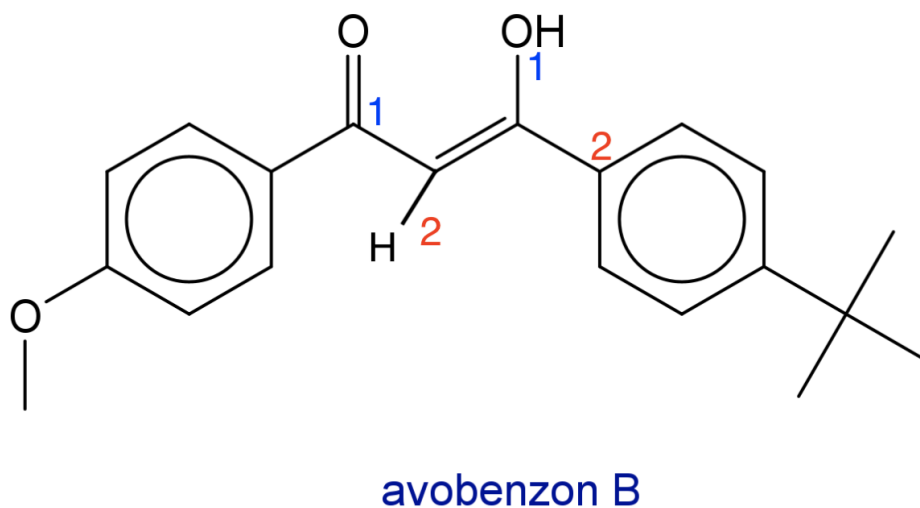
a. Vi ser fra absorptionsspektret (fig. 5), at absorptionen er størst i området 330 nm til 380 nm, hvilket ligger indenfor området af UV-A. Altså beskytter avobenzon især mod ultraviolet stråling fra solen i form af UV-A.



Figur 5: Absorptionsspektrum

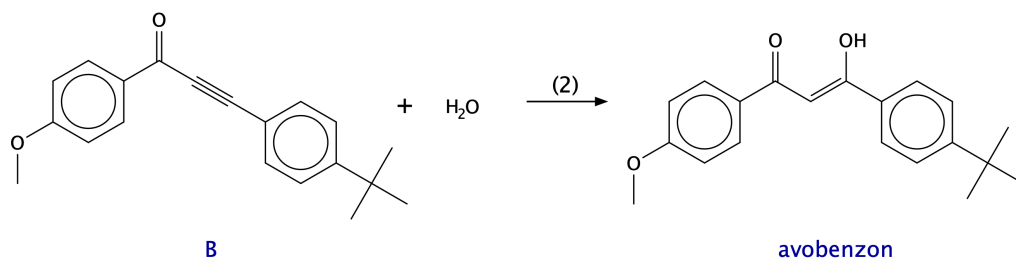
b. Avobenzon B kan udvise stereoisomeri, da der ikke er omdrejningsfrihed ved dobbeltbindingen (se fig. 6), og der sidder fire distinkte grupper på de to C-atomer, hvorimellem dobbeltbindingen sidder.

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.



Figur 6: Avobenzon B kan udvise stereoisomeri

c. Det er klart, at reaktion (1) er en eliminationsreaktion, da der dannes en trippelbinding mellem to C-atomer under fraspaltning af et mindre molekyle. Tilsvarende må reaktion (2) være en additionsreaktion, idet en binding i en trippelbinding brydes, og der lægges et molekyle til. Det færdiggjorte reaktionsskema for (2) ses i fig. 7.



Figur 7: Reaktionsskema for reaktion (2)

d. Der gælder, at fasen med octan-1-ol er upolær, hvor fasen med vand er polær. Ved $pH = 4$ har avobenzon ikke afgivet en hydron, og er overvejende upolær grundet de mange C–H-bindinger. Derfor kan den bedre opløses i octan-1-ol, som også er upolær.

Ved $pH = 12$ har avobenzon afgivet en hydron og bliver da til en ion. Den får derfor en stærk polær karakter, og kan bedre opløses i vandfasen end ved $pH = 4$. Det følger så direkte fra definitionen for D , at D aftager fra $pH = 4$ til $pH = 12$. Dette er i overensstemmelse med, at $D = 3,3 \cdot 10^4$ ved $pH = 4$ og $D = 10$ ved $pH = 12$.

Opgave 3: Bio-ortogonal kemi

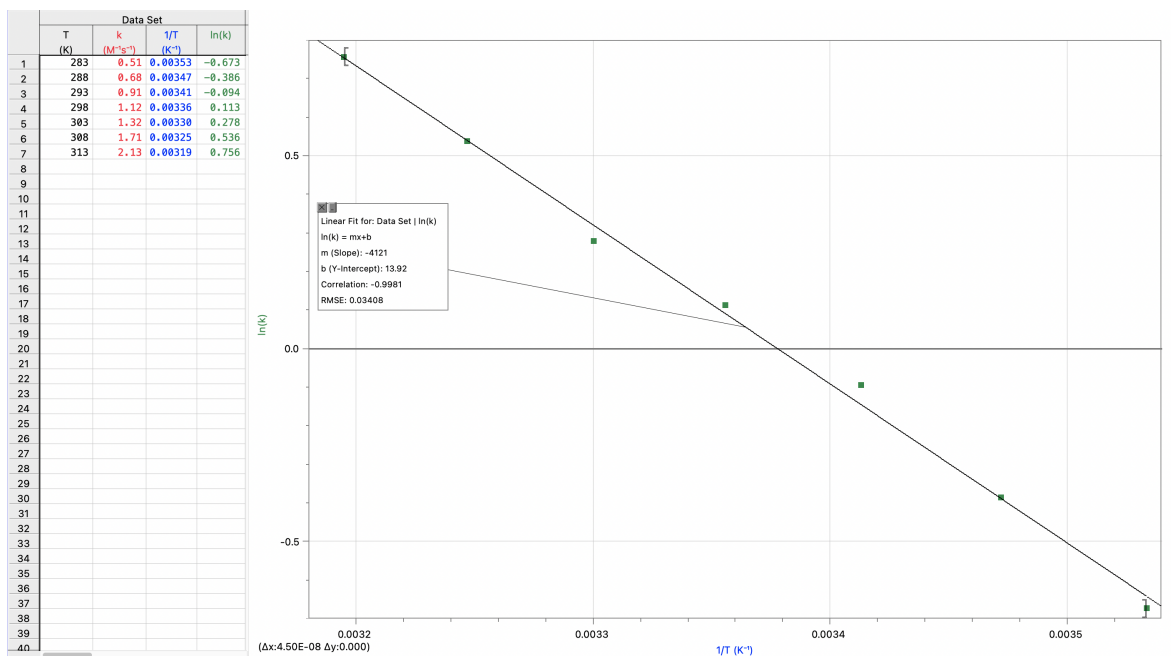
Løsning:

a. Vi beregner den formelle stofmængdekonzentration af A i opløsningen.

$$\begin{aligned}
 c(A) &= \frac{n(A)}{V} \\
 &= \frac{m(A)}{V \cdot M(A)} \\
 &= \frac{19 \text{ mg}}{5,0 \text{ mL} \cdot 408,5 \text{ g/mol}} \\
 &\approx 0,0093 \text{ M}
 \end{aligned}$$

Den formelle stofmængdekonzentration af A i opløsningen er altså $c(A) = 0,0093 \text{ M}$.

b. Vi undersøger først, om reaktionen følger Arrhenius-ligningen ved at lave et Arrhenius-plot, hvilket ses i fig. 8 og så lave lineær regression. Det ses, at punkterne på $(\frac{1}{T}, \ln(k))$ -grafen tilnærmelsesvist ligger på en ret linje, hvilket vil sige, at reaktionen følger Arrhenius-ligningen.



Figur 8: Arrheniusplot lavet med Logger Pro

Fra Arrhenius-ligningen

$$\ln(k) = -\frac{E_a}{R} \cdot \frac{1}{T} + \ln(k_0)$$

har vi så, at linjens hældningskoefficient må være $\alpha = -\frac{E_a}{R}$. Vi kan da udregne aktiveringsenergien ud fra hældningskoefficienten:

$$\begin{aligned} E_a &= -\alpha \cdot R \\ &= -(-4121 \text{ K}) \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \\ &\approx 3,43 \cdot 10^4 \text{ J/mol} \\ &= 34,3 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Aktiveringsenergien for reaktionen er altså $E_a = 34,3 \text{ kJ/mol}$.

c. Vi starter med at sammenligne forsøg nr. 1 og 2. Her er $[B]_0$ ens, hvor $[A]_0$ er dobbelt så stor i forsøg nr. 1 som i nr. 2. Siden vi har

$$\begin{aligned} 2 \cdot v_0(\text{forsøg 2}) &= 2 \cdot 0,69 \cdot 10^{-4} \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ &= 1,38 \cdot 10^{-4} \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ &\approx v_0(\text{forsøg 1}), \end{aligned}$$

så må $x = 1$.

Vi sammenligner nu forsøg nr. 4 og nr. 5. Her er $[A]_0$ ens, hvor $[B]_0$ er dobbelt så stor i forsøg nr. 4 som i nr. 5. Siden vi har

$$\begin{aligned} 2 \cdot v_0(\text{forsøg 5}) &= 2 \cdot 0,35 \cdot 10^{-4} \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ &= 0,70 \cdot 10^{-4} \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \\ &= v_0(\text{forsøg 4}), \end{aligned}$$

så må vi også have $y = 1$.

Vi kan nu finde et udtryk for hastighedskonstanten ud fra hastighedsudtrykket.

$$v = k \cdot [A] \cdot [B] \iff k = \frac{v}{[A] \cdot [B]}$$

Vi beregner det aritmetiske gennemsnit af hver k tilhørende hvert delforsøg, som udregnes med det ovenstående udtryk.

$$k = \frac{1}{5} \sum_{k=1}^5 \frac{v_0(\text{forsøg } k)}{[A]_0(\text{forsøg } k) \cdot [B]_0(\text{forsøg } k)}$$
$$\approx 0,97 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

Vi har altså fået $x = 1$, $y = 1$ og $k = 0,97 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.