

Opgavesæt 1
3.b kemi A

Kevin Zhou

22. september 2024

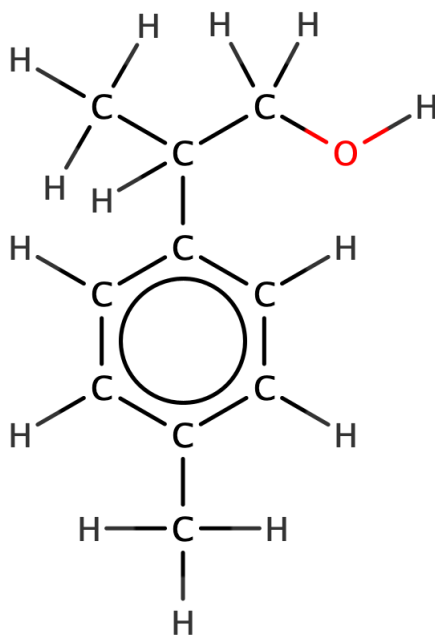
Note:

Databog fysik kemi (2007) er benyttet ved beregningerne.

Opgave 1: Aromastoffer i oregano

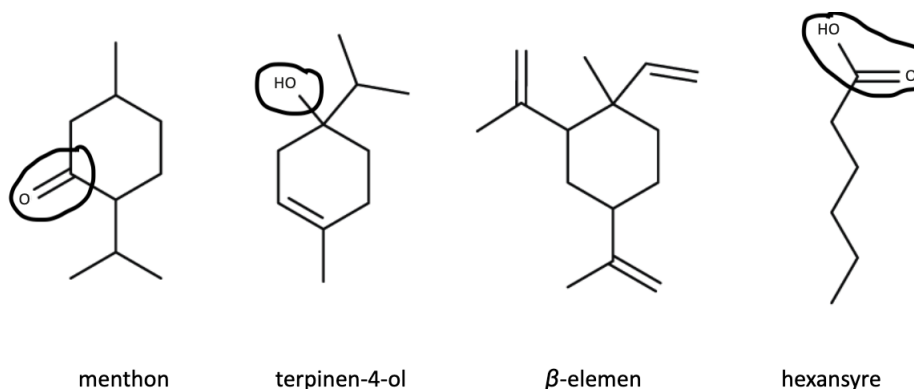
Løsning:

a. 2-(4-methylphenyl)propan-1-ol, som ses i fig. 1 er en strukturisomer til carvacrol, da de har samme molekylformel, men forskellig strukturformler. Isomeren er også en primær alkohol, da hydroxy-gruppen sidder på et endestillet C-atom i en alifatisk C-kæde.



Figur 1: 2-(4-methylphenyl)propan-1-ol tegnet i MarvinSketch

b. De funktionelle grupper markeret i de fire stoffer ses i fig. 2.



Figur 2: De funktionelle grupper markeret med en bolle omkring sig

Det er da klart, at menthon er en keton, terpinen-4-ol er en alkohol, hexansyre er en carboxylsyre og β -elemen (som er et carbonhydrid) ikke indeholder nogen funktionelle grupper.

Opgave 1: Nitrat i grundvand

Løsning:

a. Den formelle stofmængdekonzentration af kaliumnitrat må være

$$\begin{aligned} c(\text{KNO}_3) &= \frac{m(\text{KNO}_3)}{V \cdot M(\text{KNO}_3)} \\ &= \frac{0,506 \text{ g}}{0,250 \text{ L} \cdot 101,10 \text{ g/mol}} \\ &\approx 0,0200 \text{ M} \end{aligned}$$

Altså har vi $c(\text{KNO}_3) = 0,0200 \text{ M}$.

b. 2-hydroxybenzoesyre (salicylsyre) har $pK_s = 2,98$ ved 25°C . Der gælder da

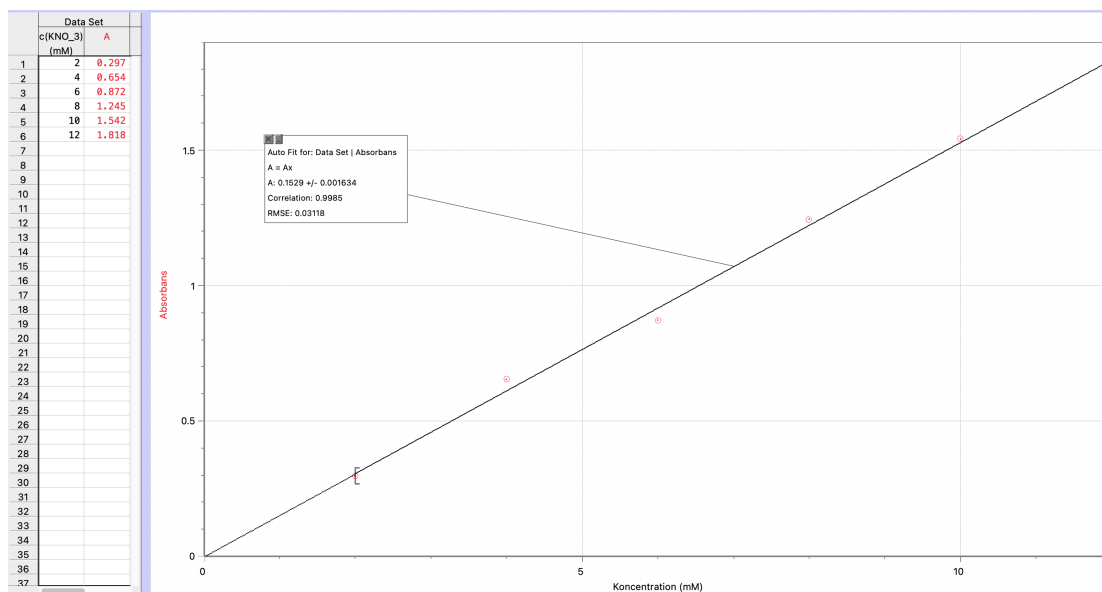
$$\begin{aligned} K_s &= \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c_s - [\text{H}_3\text{O}^+]} \Rightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = \frac{-K_s + \sqrt{K_s^2 - 4 \cdot (-K_s \cdot c_s)}}{2} \\ &\Leftrightarrow \text{pH} = -\log \left(\frac{-K_s + \sqrt{K_s^2 - 4 \cdot (-K_s \cdot c_s)}}{2 \text{ M}} \right) \end{aligned}$$

Vi kan nu regne pH ud med $K_s = 10^{-pK_s} \text{ M} = 10^{-2,98} \text{ M}$.

$$\begin{aligned} \text{pH} &= -\log \left(\frac{-K_s + \sqrt{K_s^2 - 4 \cdot (-K_s \cdot c_s)}}{2 \text{ M}} \right) \\ &= -\log \left(\frac{-10^{-2,98} \text{ M} + \sqrt{(10^{-2,98} \text{ M})^2 - 4 \cdot (-10^{-2,98} \text{ M} \cdot 0,018 \text{ M})}}{2 \text{ M}} \right) \\ &\approx 2,4 \end{aligned}$$

Altså er pH i den mættede salicylsyreopløsning 2,4.

c. Det ses fra resultaterne, at absorbansen generelt er maksimal ved bølgelængden 411 nm. Absorbansen målt ved de forskellige koncentrationer sættes ind i Logger Pro, hvor vi laver en ligefrem proportionel regression (grundet Lambert Beers lov), hvilket kan ses i fig. 3.



Figur 3: Sammenhængen mellem absorbansen og koncentrationen af KNO_3 findes med Logger Pro

Fra vores regression har vi

$$A = 0,1529 \frac{1}{\text{mM}} \cdot c(\text{KNO}_3) \iff c(\text{KNO}_3) = \frac{A}{0,1529} \text{ mM}$$

Vi kan nu regne den formelle koncentration af kaliumnitrat i vandprøven ud.

$$\begin{aligned} c(\text{KNO}_3) &= \frac{A}{0,1529} \text{ mM} \\ &= \frac{0,960}{0,1529} \text{ mM} \\ &= 6,27861 \text{ mM} \end{aligned}$$

Siden $[\text{NO}_3^-] = c(\text{KNO}_3)$, så gælder der, at indholdet af nitrat må være

$$\begin{aligned} [\text{NO}_3^-] \cdot M(\text{NO}_3^-) &= c(\text{KNO}_3) \cdot M(\text{NO}_3^-) \\ &= 6,27861 \text{ mM} \cdot 62,00 \text{ g/mol} \\ &\approx 3,9 \cdot 10^2 \text{ mg/L} \end{aligned}$$

Vi har altså bestemt indholdet af nitrat i vandprøven til at være $3,9 \cdot 10^2 \text{ mg/L}$.

Opgave 2: IVA - en genetisk stofskiftesygdom

Løsning:

a. 3-methylbutansyre har $pK_s = 4,77$ ved 25°C . Da det er en svag syre, kan vi uden at det medfører større fejl regne pH med

$$\begin{aligned} pH &= \frac{1}{2} \cdot \left(pK_s - \log\left(\frac{c_s}{M}\right) \right) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \left(4,77 - \log\left(\frac{0,15 \text{ M}}{M}\right) \right) \\ &\approx 2,8 \end{aligned}$$

Altså er pH i opløsningen 2,8.

b. Vi finder først et udtryk for den formelle stofmængdekonzentration af syren.

$$\begin{aligned} pH &= \frac{1}{2} \cdot \left(pK_s - \log\left(\frac{c_s}{M}\right) \right) \iff \log\left(\frac{c_s}{M}\right) = pK_s - 2 \cdot pH \\ &\iff c_s = 10^{pK_s - 2 \cdot pH} M \end{aligned}$$

Den del af isovalerianesyre (som vi betegner S), der findes på syreform, når vi ser bort fra vands selvionisering, i urin må være

$$\begin{aligned} x_s &= 1 - \alpha(S) \\ &= 1 - \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]}{c_s} \\ &= 1 - \frac{10^{-pH} M}{10^{pK_s - 2 \cdot pH} M} \\ &= 1 - 10^{pH - pK_s} \\ &= 1 - 10^{4,5 - 4,77} \\ &\approx 0,46 \\ &= 46\% \end{aligned}$$

Altså findes 46 % af isovalerianesyre på syreform ved pH 4,5 og ved 25°C .

c. Stofmængden af henholdsvis C, H, N og O må være

$$n(\text{C}) = \frac{m(\text{C})}{M(\text{C})} = \frac{52,82 \text{ g}}{12,01 \text{ g/mol}} = 4,3980 \text{ mol}$$

$$n(\text{H}) = \frac{m(\text{H})}{M(\text{H})} = \frac{8,23 \text{ g}}{1,01 \text{ g/mol}} = 8,1485 \text{ mol}$$

$$n(\text{N}) = \frac{m(\text{N})}{M(\text{N})} = \frac{8,80 \text{ g}}{14,01 \text{ g/mol}} = 0,6281 \text{ mol}$$

$$n(\text{O}) = \frac{m(\text{O})}{M(\text{O})} = \frac{30,15 \text{ g}}{16,00 \text{ g/mol}} = 1,8844 \text{ mol}$$

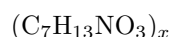
Vi beregner nu stofmængdeforholdene ved at dividere den mindste stofmængde op i de øvrige.

$$\frac{n(\text{C})}{n(\text{N})} = \frac{4,3980 \text{ mol}}{0,6281 \text{ mol}} = 7,002 \approx 7$$

$$\frac{n(\text{H})}{n(\text{N})} = \frac{8,1485 \text{ mol}}{0,6281 \text{ mol}} = 12,97 \approx 13$$

$$\frac{n(\text{O})}{n(\text{N})} = \frac{1,8844 \text{ mol}}{0,6281 \text{ mol}} = 3,000 \approx 3$$

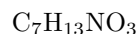
Stoffet B's molekylformel må altså være af formen



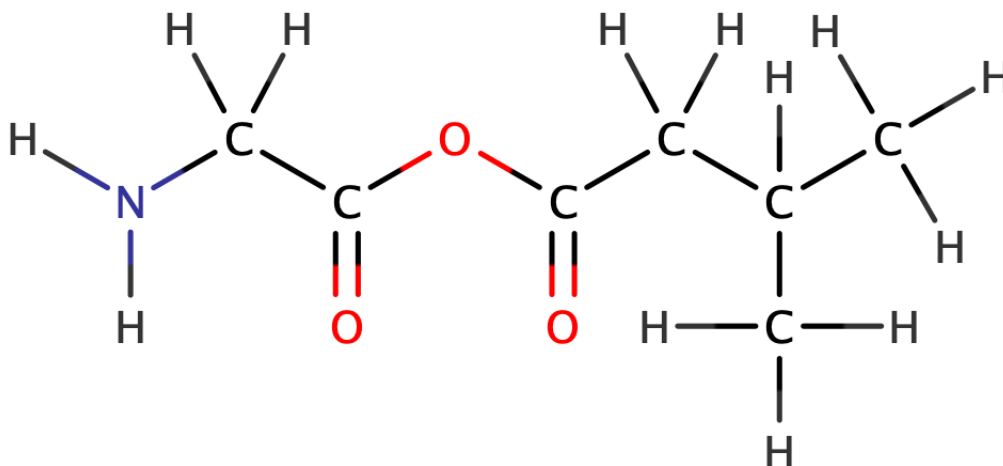
Da vi kender B's molare masse, kan vi beregne x

$$\begin{aligned} x &= \frac{M(\text{B})}{M(\text{C}_7\text{H}_{13}\text{NO}_3)} \\ &= \frac{159,18 \text{ g/mol}}{159,18 \text{ g/mol}} \\ &= 1 \end{aligned}$$

Altså må molekylformlen for B være



Ved en kondensationsreaktion sker en sammenbinding af to organiske molekyler under fraspaltning af et vandmolekyle. Da giver molekylformlen for B mening, hvis stoffet dannes ved en kondensationsreaktion mellem glycin og isovaleriansyre. En mulig struktur for B ses da i fig. 4.



Figur 4: En mulig strukturformel for B tegnet i MarvinSketch