

Terminsprøve
Kemi A

11. marts 2025

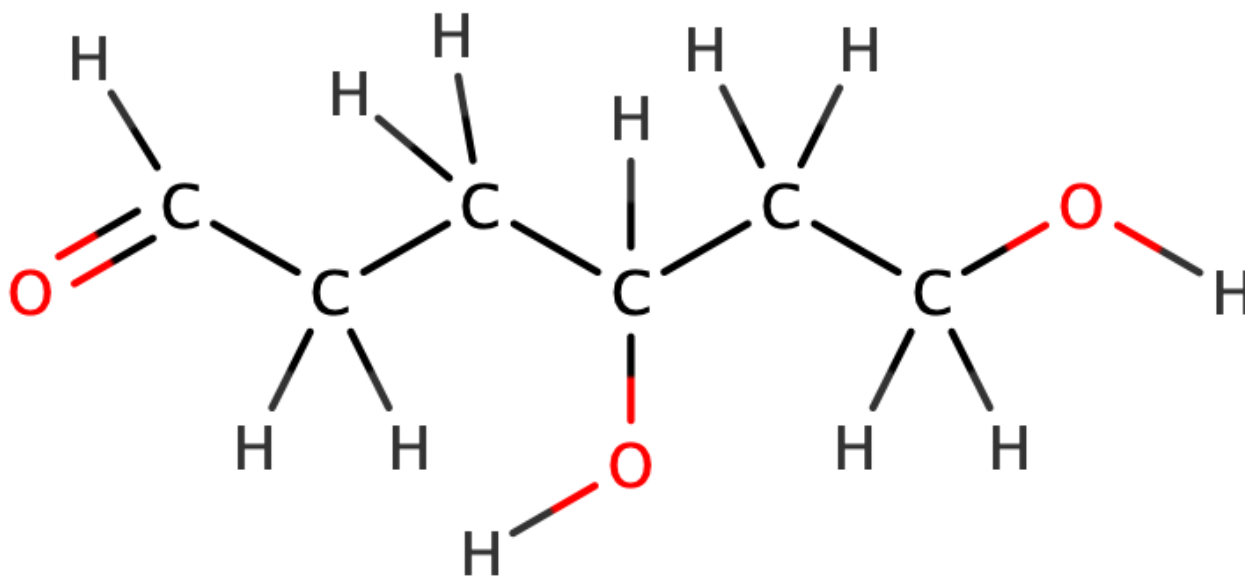
Note:

Databog fysik kemi (2007) er benyttet ved beregningerne.

Opgave 1: PEF - en ny type bioplast

Løsning:

- a. En strukturisomer til A, som indeholder en aldehydgruppe ses i fig. 1.



Figur 1: Strukturisomer til stof A

- b. For at bestemme strukturen for B, finder vi først den empiriske formel. Fra elementaranalysen har vi, at der i 100 g af stoffet må være

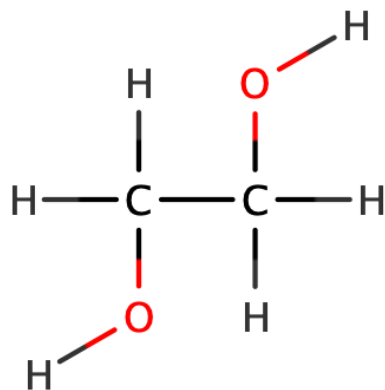
$$\begin{aligned} n(\text{C}) &= \frac{38,70 \text{ g}}{12,01 \text{ g/mol}} = 3,222 \text{ mol} \\ n(\text{H}) &= \frac{9,74 \text{ g}}{1,008 \text{ g/mol}} = 9,663 \text{ mol} \\ n(\text{O}) &= \frac{51,55 \text{ g}}{16,00 \text{ g/mol}} = 3,222 \text{ mol} \end{aligned}$$

Vi beregner nu stofmængdeforholdene.

$$\begin{aligned} \frac{n(\text{C})}{n(\text{O})} &= \frac{3,222 \text{ mol}}{3,222 \text{ mol}} = 1 \\ \frac{n(\text{H})}{n(\text{O})} &= \frac{9,663 \text{ mol}}{3,222 \text{ mol}} = 2,999 \approx 3 \end{aligned}$$

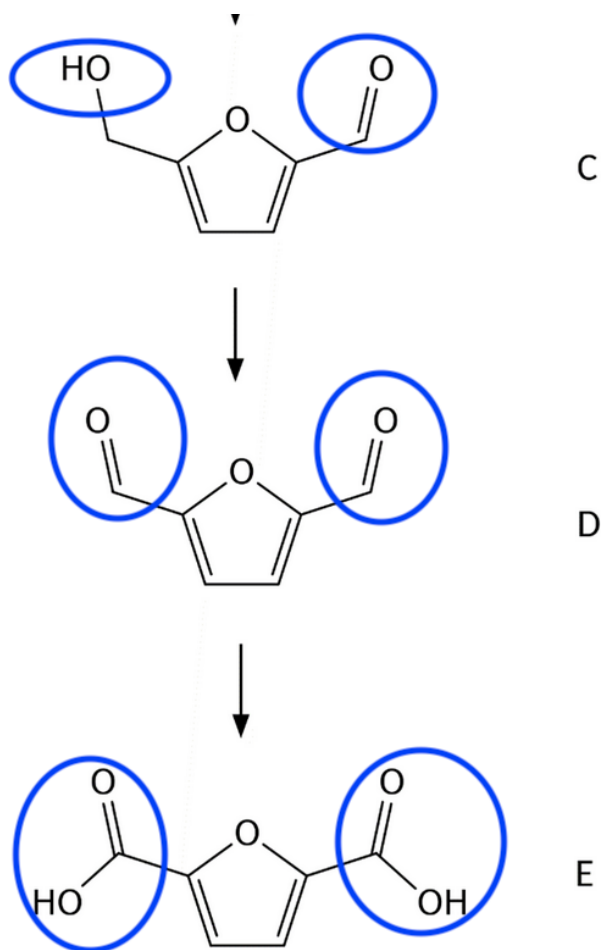
Forholdet mellem stofmængderne af C, H og O er altså med stor nøjagtighed 1:3:1. Stoffet B's empiriske formel må da være CH_3O .

Da det oplyses, at B indeholder netop to O-atomer, så må molekylformlen for B være $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}_2$. Siden B er en alkohol og har en symmetrisk struktur, så må den eneste mulige struktur for B være som i fig. 2.



Figur 2: Struktur for B

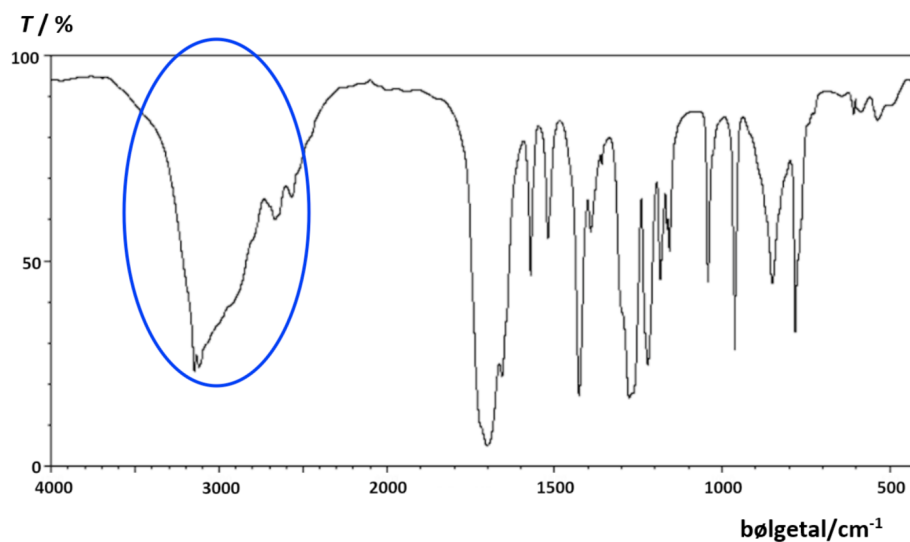
c. Vi ser på fig. 3, at C indeholder både en hydroxy-gruppe og en aldehyd-gruppe, hvor D indeholder to aldehyd-grupper, og E indeholder to syre-grupper.



Figur 3: Strukturer for C, D og E med vigtige grupper markeret

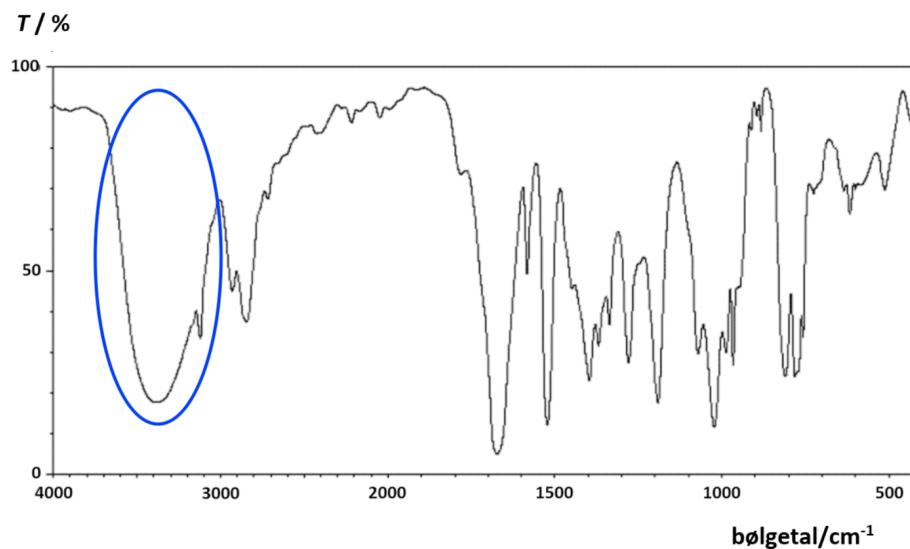
Stof E er det eneste stof, der er en carboxylsyre, og dets IR-spektrum må da indeholde et meget bredt bånd

ved omkring $2500\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$, der er grundet O–H-strækningsvibrationerne i carboxylsyre-gruppen. Vi ser, at det første IR-spektrum må passe til stof E (fig. 4).



Figur 4: IR-spektrum for stof E

Tilsvarende er stof C det eneste stof, der indeholder en hydroxy-gruppe, og dets IR-spektrum må da indeholde et bredt bånd ved omkring $3100\text{--}3600\text{ cm}^{-1}$, der er grundet O–H-strækningsvibrationerne i hydroxy-gruppen. Vi ser, at det sidste IR-spektrum må passe til stof C (fig. 5).



Figur 5: IR-spektrum for C

Opgave 2: 1080 - et rodenticid

Løsning:

a. Reaktionen er en substitutionsreaktion, da der er tale om et atom, der udskiftes med et andet atom (eller her en ion). Det understøttes af reaktionsskemaet, hvor vi ser chlorid blive udskiftet med fluorid. Altså er reaktionen en substitutionsreaktion.

b. Siden $pK_s = 2,59$, så er der tale om en middelstærk syre. Der gælder da

$$K_s = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+]^2}{c_s - [\text{H}_3\text{O}^+]} \Rightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = \frac{-K_s + \sqrt{K_s^2 - 4 \cdot (-K_s \cdot c_s)}}{2}$$

$$\Leftrightarrow pH = -\log \left(\frac{-10^{-pK_s} \text{ M} + \sqrt{(10^{-pK_s} \text{ M})^2 - 4 \cdot (-10^{-pK_s} \text{ M} \cdot c_s)}}{2 \text{ M}} \right)$$

fordi $pH = -\log \left(\frac{[\text{H}_3\text{O}^+]}{\text{M}} \right)$. Vi indsætter de kendte værdier og udregner pH.

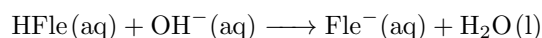
$$pH = -\log \left(\frac{-10^{-pK_s} \text{ M} + \sqrt{(10^{-pK_s} \text{ M})^2 - 4 \cdot (-10^{-pK_s} \text{ M} \cdot c_s)}}{2 \text{ M}} \right)$$

$$= -\log \left(\frac{-10^{-2,59} \text{ M} + \sqrt{(10^{-2,59} \text{ M})^2 - 4 \cdot (-10^{-2,59} \text{ M} \cdot 1,3 \cdot 10^{-4} \text{ M})}}{2 \text{ M}} \right)$$

$$\approx 3,91$$

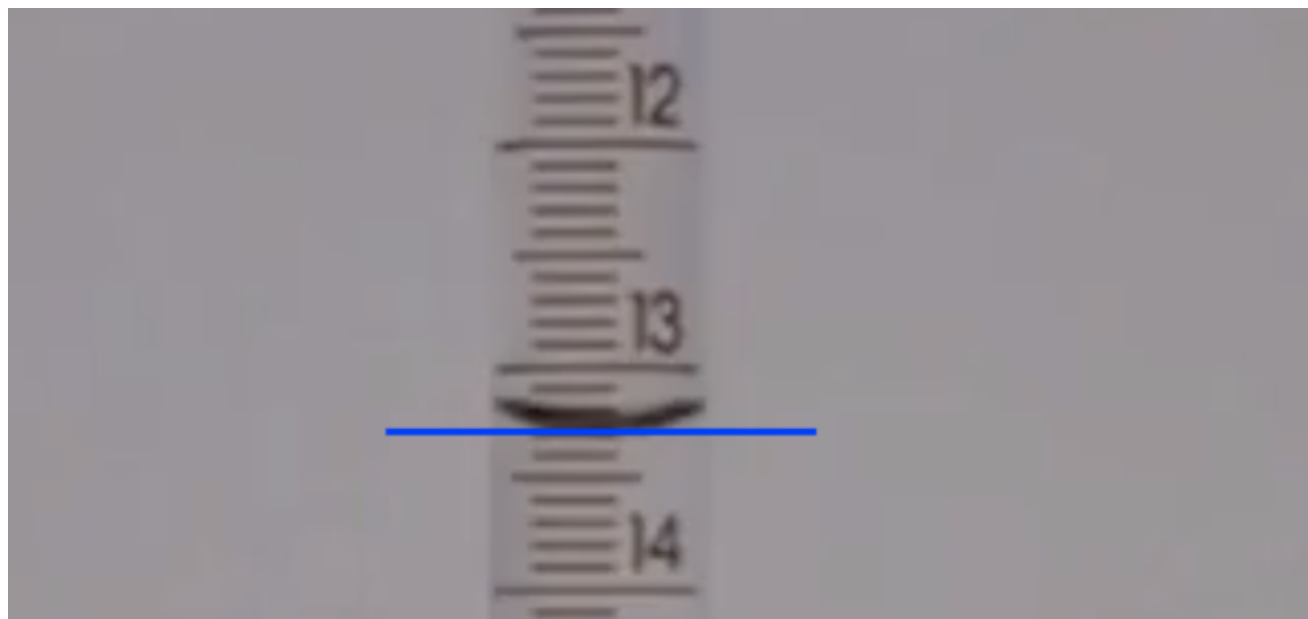
Altså vil det sige, at i opløsningen ved 25 °C er $pH = 3,91$.

c. Vi lader HFle betegne fluorethansyre. Så bliver titreringsreaktionen



Vi ser, at reaktionsforholdet mellem fluorethansyre og NaOH er 1:1.

Grundet indikatoren skifter blandingen farve ved ækvivalenspunktet, hvor $n(\text{HFle}) = n(\text{NaOH})$. Vi aflæser (se fig. 6), at der ved ækvivalenspunktet er tilsat 13,3 mL af NaOH-opløsningen.



Figur 6: Aflæsning af den tilsatte volumen NaOH-opløsning ved ækvivalenspunktet

Ved ækvivalenspunktet gælder der

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

$$\Leftrightarrow c(\text{HFle}) = \frac{c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH})}{V(\text{HFle})}$$

Vi indsætter nu de kendte værdier og udregner $c(\text{HFle})$.

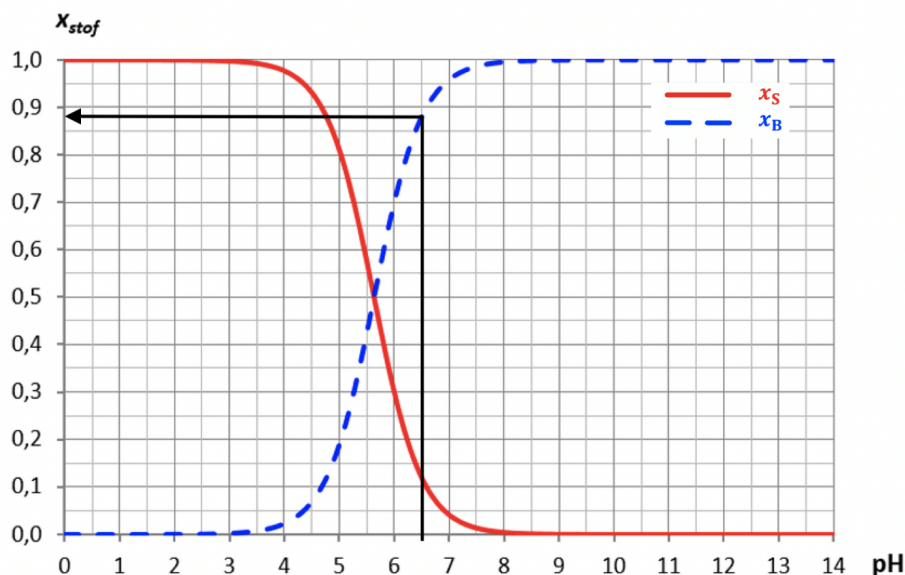
$$\begin{aligned} c(\text{HFle}) &= \frac{c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH})}{V(\text{HFle})} \\ &= \frac{0,089 \text{ M} \cdot 13,3 \text{ mL}}{10,0 \text{ mL}} \\ &\approx 0,118 \text{ M} \end{aligned}$$

Stofmængdekonzentrationen af fluorethansyre i den vandige opløsning er altså $c(\text{HFle}) = 0,118 \text{ M}$.

d. Ved $\text{pH} = 6,5$ aflæses (se fig. 7) for coumatetralyl:

Blå kurve : $x_B = 0,88$ (88 %)

Ved $\text{pH} = 6,5$ er procentdelen af coumatetralyl, der findes på baseform altså 88 %.

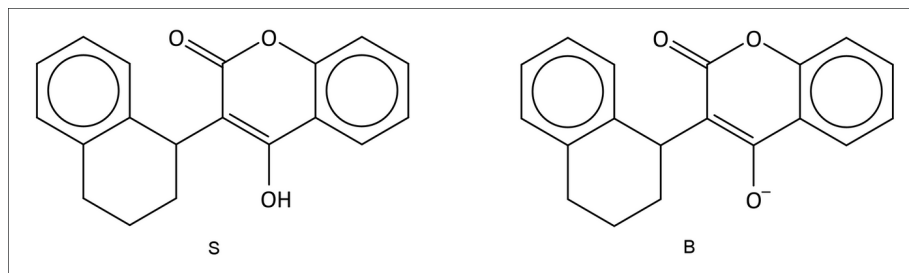


Figur 7: Aflæsning på fordelingsdiagrammet

e. I fig. 8 ses det, at at baseformen B i høj grad må have en stærk polær karakter, da det er en ion. Tilsvarende er syreformen S overvejende upolær, da den indeholder virkeligt mange hydrofobe grupper (f.eks. C-H). Altså kan baseformen B let opløses i vand mens opløseligheden i octan-1-ol er lav. Modsat kan syreformen S let opløses i octan-1-ol, mens opløseligheden i vand er lav.

Fra fordelingsdiagrammet fig. 7 ser vi, at når pH vokser, så aftager andelen af coumatetralyl på syreform, hvor andelen af coumatetralyl på baseform vokser. Det er da klart, at så må andelen af coumatetralyl opløst i octan-1-ol aftage, og andelen af coumatetralyl opløst i vand vokse.

Når pH vokser må D derfor aftage, hvilket vil sige, at $\log(D)$ også aftager.



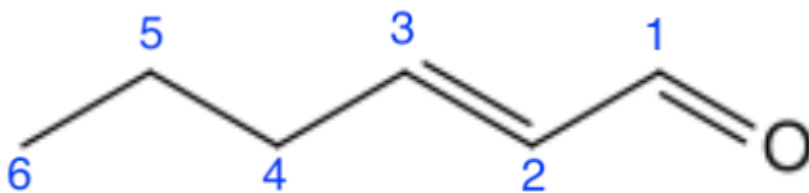
Figur 8: Strukturer for coumatetralyl

Opgave 3: Mango

Løsning:

a. Den funktionelle gruppe med højst prioritet er aldehydgruppen. Navnet får derfor suffikset -al og C-atomerne nummeres fra højre (se fig. 9). Der er også en dobbeltbinding ved C-atom nr. 2, hvilket angives med -2-en. Siden der kan forekomme geometrisk isomeri skal vi angive, om der er tale om en Z- eller E-form. Da de to ens grupper (H-atomerne) sidder på hver sin side af dobbeltbindingen, må det være en trans-form, der altid er en E-form. Dette angives med præfikset (2E)-.

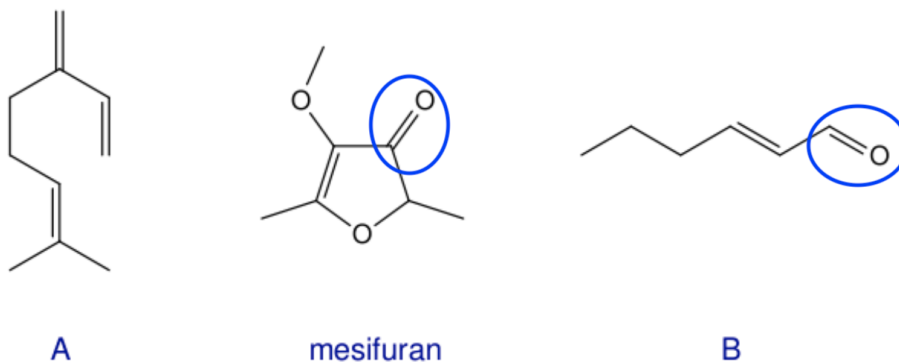
Den længste kæde af C-atomer i stoffet er 6 lang, og derfor må -hex- indgå i navnet. Det systematiske navn for B bliver da (2E)-hex-2-enal.



Figur 9: Strukturformlen for B

b. Det ses i fig. 10, at kun mesifuran og stof B indholder en carbonylgruppe. Disse kan nemt påvises ved reaktion med 2,4-dinitrophenylhydrazin, som netop påviser carbonylgrupper. Kun stof A vil da ikke danne gult bundfald ved reaktion med 2,4-dinitrophenylhydrazin.

For at skelne mellem mesifuran og stof B kan man så bruge Tollens reagens, der reagerer med aldehyder men ikke ketoner. Altså vil stof B reagere med Tollens reagens, hvor mesifuran ikke vil reagere.



Figur 10: Strukturer for tre stoffer

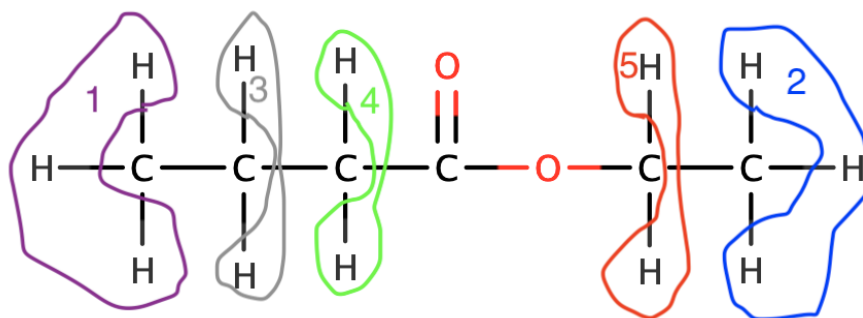
c. Vi betragter ^1H -NMR-spektret for D. Et opsummerende skema ses i table 1.

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	0,95	3	Triplet	2	$\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--}$	0,9
2	1,22	3	Triplet	2	$\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--O--CO}$	1,2
3	1,62	2	Sektet	5	$\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--CH}_2\text{--CO--O--}$	1,7
4	2,30	2	Triplet	2	$\text{--CH}_2\text{--CH}_2\text{--CO--O--C}$	2,2
5	4,11	2	Kvartet	3	$\text{CH}_3\text{--CH}_2\text{--O--CO--C}$	4,1

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

Siden R^1 og R^2 er alkylgrupper, så må der være to CH_3 -grupper i D. Disse må høre til signal nr. 1 og signal nr. 2. Fra de kemiske skift og opsplitningen har vi så, at ^1H -kernerne hørende til signal nr. 2 må koble til ^1H -kernerne hørende til signal nr. 5. Tilsvarende må ^1H -kernerne hørende til signal nr. 1 koble til ^1H -kernerne hørende til signal nr. 3, som til sidst er nødt til at koble til ^1H -kernerne hørende til signal nr. 4.

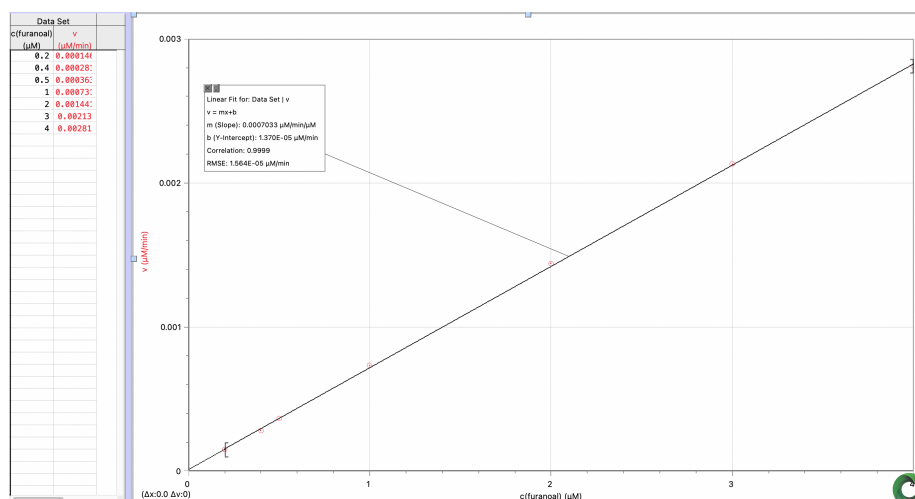
Vi har da en CH_3 -gruppe bundet til en CH_2 -gruppe bundet til et O. Derudover har vi en CH_3 -gruppe bundet til en CH_2 -gruppe bundet til endnu en CH_2 -gruppe bundet til en CO-gruppe. Strukturen for D må da være som i fig. 11.

Figur 11: Struktur for D med signaler hørende til ^1H -kernerne markeret og numereret

d. Hvis reaktionen er af første orden, så må der gælde, at

$$v = k \cdot c(\text{furaneol})$$

Det vil sige, at punkterne på $(c(\text{furaneol}), v)$ -grafnen skal ligge tilnærmelsesvist på en ret linje gennem (0,0). Vi sætter da datapunkterne, hvor $c(\text{furaneol}) < 5 \mu\text{M}$ ind i Logger Pro og laver en ligefrem proportional regression, hvilket ses i fig. 12.



Figur 12: Lineær regression på $(c(\text{furaneol}), v)$ -graf lavet i Logger Pro

Det ses, at punkterne (hvor $c(\text{furaneol}) < 5 \mu\text{M}$) på $(c(\text{furaneol}), v)$ -graf ligger tilnærmelsesvist på en ret linje gennem $(0,0)$, og reaktionen er altså af første orden. Fra regressionen får vi hastighedsudtrykket

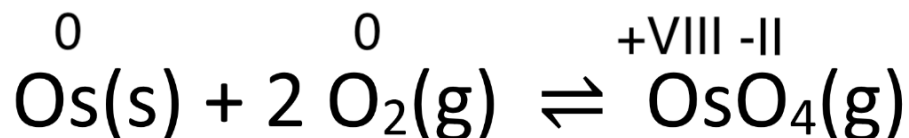
$$v = 0,000703 \text{ min}^{-1} \cdot c(\text{furaneol}) + 1,37 \cdot 10^{-5} \mu\text{M}/\text{min}$$

Det skal bemærkes, at konstantleddet er så lille, at det kan ignoreres.

Opgave 4: Osmium - grundstofferne sværvægter

Løsning:

a. Der er tale om en redoxreaktion, da der både sker en oxidation og en reduktion. Dette fremgår klart af fig. 13, hvor oxidationstallene også er angivet.



Figur 13: Reaktionsskema med oxidationstal angivet

b. Vi har fra figuren, at

$$\Delta G^\circ = 0,149 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot T - 337 \text{ kJ/mol}$$

Der gælder derudover følgende sammenhæng mellem ΔG° og den absolutte temperatur T :

$$\Delta G^\circ = -\Delta S^\circ \cdot T + \Delta H^\circ$$

Ved at kombinere de to udtryk får vi, at

$$\begin{aligned} \Delta S^\circ &= -0,149 \frac{\text{kJ}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \\ \Delta H^\circ &= -337 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Vi ser, at $\Delta S^\circ < 0$, hvilket vil sige, at ordenen øges. Det er i overensstemmelse med reaktionsskemaet, hvor to gasmolekyler og et fast stof bliver til ét gasmolekyle.

c. Vi beregner først den absolutte temperatur.

$$\begin{aligned} T &= \frac{t \cdot \text{K}}{^{\circ}\text{C}} + 273,15 \text{ K} \\ &= \frac{400 \text{ }^{\circ}\text{C} \cdot \text{K}}{^{\circ}\text{C}} \\ &= 673,15 \text{ K} \end{aligned}$$

Vi opskriver ligevægtsloven for reaktionen for at bestemme enheden for K .

$$K = \frac{p(\text{OsO}_4)}{p(\text{O}_2)^2}$$

Vi ser da, at enheden for K må være bar^{-1} .

Fra van't Hoffs ligning gælder der, at

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

Vi indsætter da de kendte værdier og beregner K .

$$\begin{aligned} K &= e^{-\frac{\Delta H^{\circ}}{R \cdot T} + \frac{\Delta S^{\circ}}{R}} \\ &= e^{-\frac{-337 \cdot 10^3 \text{ J/mol}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 673,15 \text{ K}} + \frac{-0,149 \cdot 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}}{8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}}} \\ &\approx 2,33 \cdot 10^{18} \end{aligned} \tag{1}$$

Ved beregningen for vi K uden enhed. Siden vi ved enheden for K er bar^{-1} , så må vi have

$$K = 2,33 \cdot 10^{18} \text{ bar}^{-1}$$

Fra ligning 1 (van't Hoffs ligning) ses det, at når T vokser, så aftager ligevægtskonstanten K (pga. $\Delta H^{\circ} < 0$). Det vil sige, at ligevægten forskydes mod venstre. Altså forskydes ligevægten mod venstre når temperaturen i reaktionsbeholderen stiger.