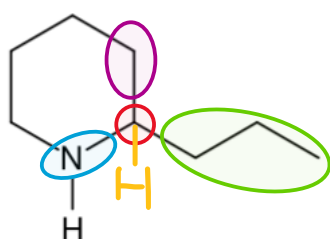


Kemi skriftlig eksamen

Opgave 1

1.a

Jeg får givet strukturen for giftstoffet coniin og jeg får også at vide at stoffet har syre base egenskaber med $pK_b = 2,82$



coniin

$pK_b = 2,82$ ved $25\text{ }^{\circ}\text{C}$

Figur 1 strukturformel for coniin

Jeg skal nu gøre rede for at coniin udviser stereoisomeri

Et stof siges at udvise stereoisomeri hvis der eksisterer flere versioner af stoffet med den samme molekylærækkefølge. De 2 former for stereoisomeri er geometrisk isomeri ved dobbeltbindinger og spejlbilledisomeri ved asymmetriske carbonatomer. Da coniin ingen dobbeltbindinger har må det derfor udvise spejlbilledisomeri. Et asymmetrisk carbonatom er et carbonatom der er bundet til 4 forskellige grupper. På stoffet findes der et asymmetrisk carbonatom (markeret med rødt) som er bundet til 4 forskellige grupper som markeres på stoffet med andre farver.

1.b

Jeg får nu at vide at en mættet vandig opløsning af coniin har en formel stofmængdekonzentration på $0,067\text{ M}$

Jeg skal nu beregne pH i opløsningen

Da coniins pK_b er mellem 0 og 4 er det en middelstærk base og jeg skal derfor bruge følgende udtryk til at finde koncentration af hydroxidioner i opløsningen

$$K_b = \frac{[OH^-]^2}{c_b - [OH^-]}$$



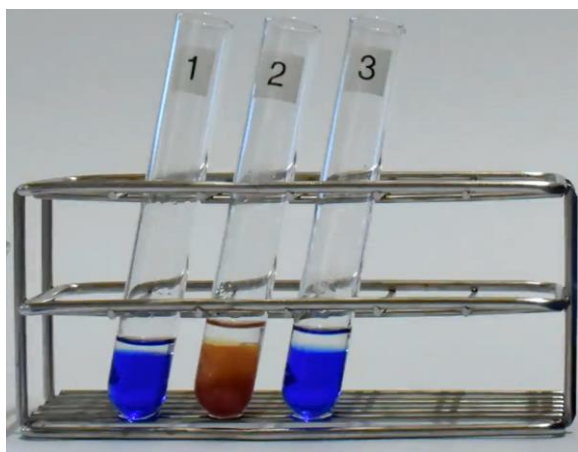
Skærmbillede 1 test med bromvand

Den næste test der udføres, er testen med 2,4-dinitrophenylhydrazin som tester for tilstedeværelsen af carbonyl grupper. Ved positiv test vil der udfældes et gult bundfald. I testen ses det at både stoffet i reagensglas 2 og 3 reagerer positivt, hvilket også passer da både stof A og C indeholder en carbonylgruppe og de kan derfor ikke tildeles et reagensglas på baggrund af denne test.



Skærmbillede 2 test med 2,4-dinitrophenylhydrazin

Den sidste test der udføres, er testen med Fehlings væske. I denne test reagerer aldehyder med kobber(II)ionerne i Fehlings væske og danner et rødbrunt bundfald. I testen ses det at stoffet i reagensglas 2 reagerer positivt og dette må derfor være et aldehyd. Da det kun er stof A der har en aldehydgruppe, må vi kunne tildele stof A til reagensglas 2 og derved også ved hjælp af udelukkelsesmetoden tildele stof C til reagensglas 3.

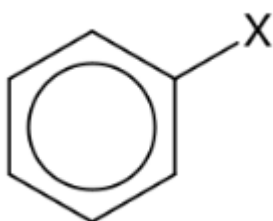


Skærmbillede 3 test med Fehlings væske

Altså indeholder reagensglas 1 stof B, reagensglas 2 stof A og reagensglas 3 stof C

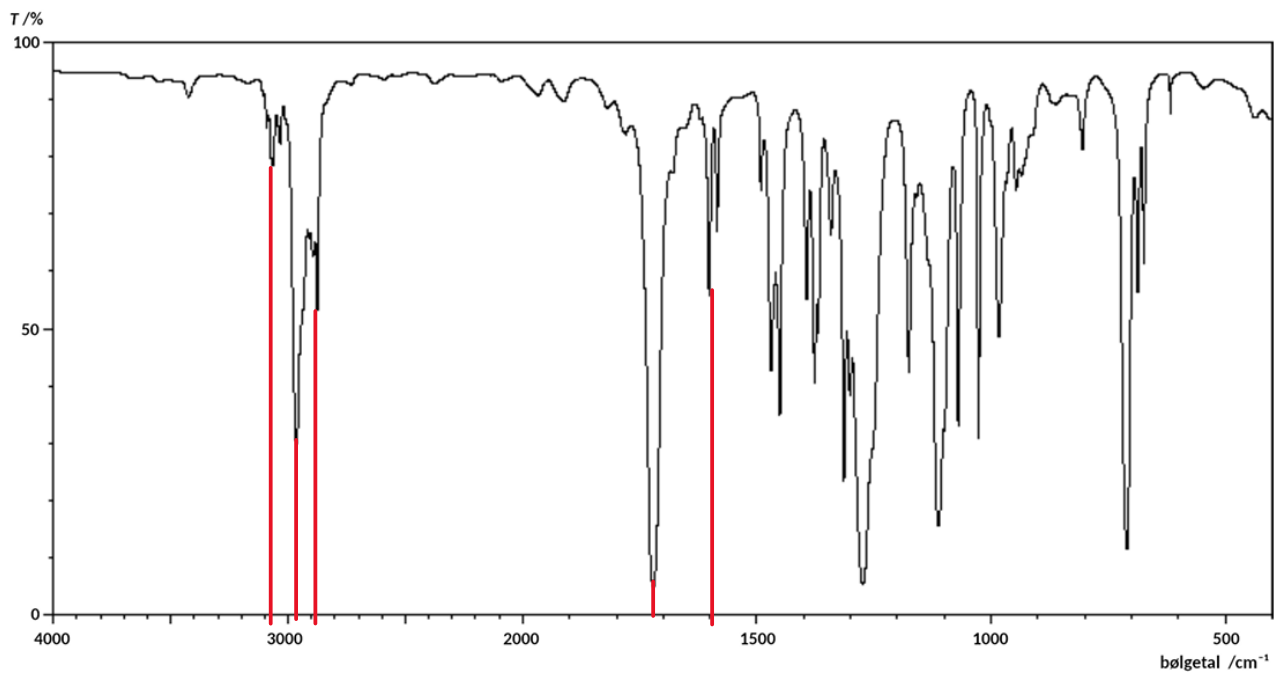
1.d

Jeg får nu givet strukturen for duftstoffet D, som også findes i planten, hvor der mangler en del af strukturen.

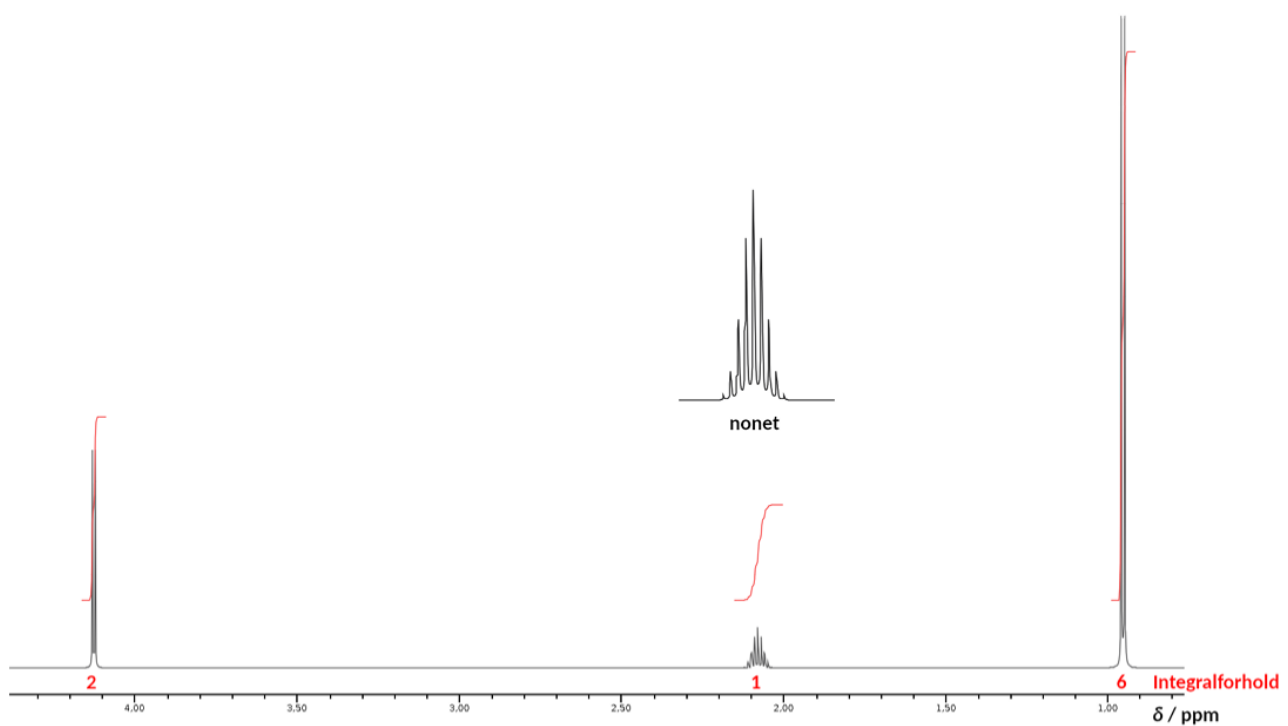


Figur 3 stof D

Jeg får også givet et IR-spektre for D samt det udsnit ^1H -NMR-spektret for D der indeholder signaler for X.



Figur 4 IR-spektre for stof D



Figur 5 ^1H -NMR-spektre for X-gruppen i stof D

Jeg skal nu bestemme strukturformlen for X-gruppen i stoffet.

Jeg starter med at kigge på IR-spektret og ser at det indeholder en par små bånd omkring 3080 cm^{-1} som er karakteristiske for C-H strækket i aromater samt et par større bånd ved omkring $2980\text{--}2880\text{ cm}^{-1}$ som er karakteristiske for C-H strækket i alkaner. IR-spektret indeholder også et meget stærkt bånd

ved omkring 1750 cm^{-1} som er karakteristiske for C=O strækket i estergruppen, og til sidst ved omkring de $1600\text{-}1570\text{ cm}^{-1}$ ses 2 svagere bånd som er karakteristiske for C=C strækket i aromater.

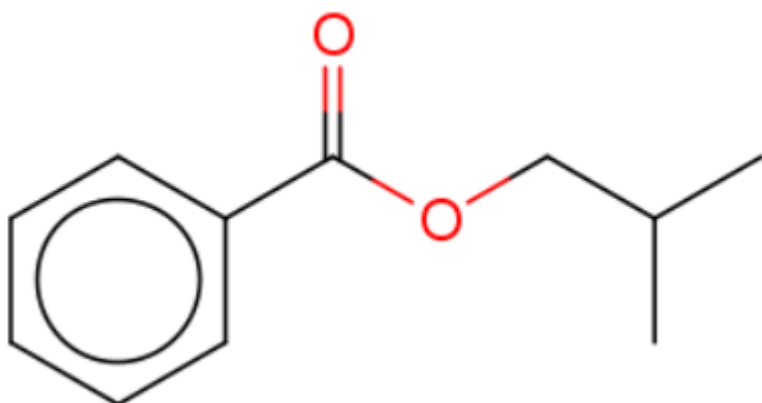
Da den del af stoffet der er givet, kun indeholder carbonatomer der sidder i den aromatiske ring ved jeg nu at X-gruppen må bestå af en række carbonatomer med en estergruppe.

Jeg kan nu med denne viden gå videre til ^1H -NMR-spektret hvor jeg gør brug af et tilordningsskema.

Signal nr.	Kemisk skift δ / ppm	Integral / areal (relativt antal ækv. ^1H -kerner)	Opsplitning / multiplicitet	Antal Nabo- ^1H	Tilordning	Tabelværdi for δ / ppm
1	4,12	2	Dublet	1	Ar-CO-O-CH ₂ -CH-	4,2
2	2,08	1	Nonet	8	-CH ₂ -CH-(CH ₃) ₂	2,0
3	0,95	6	Dublet	1	-CH-(CH ₃) ₂	0,9

Tabel 1 tilordningsskema for ^1H -NMR-spektret for X-gruppen

Ud fra dette tilordningsskema kan jeg nu tegne strukturen af stof D med X-gruppen



Figur 6 strukturen af stof D med X-gruppen

Opgave 2

2.a

Jeg får at vide at en bestemt type brillerens indeholder mellem 10 og 20 volumenprocent propan-2-ol. Jeg får også givet en video hvori der fremstilles en standardopløsning af propan-2-ol.

Jeg skal nu beregne stofmængdekonzentrationen af propan-2-ol i den fremstillede standardopløsning.

I videoen bliver der tilføjet 2,903 g propan-2-ol til en 25 mL målekolbe hvorefter der fyldes op med vand.

Jeg finder nu molarmassen af propan-2-ol i en databog til at være 60,10 g/mol.

Jeg kan nu bestemme stofmængden af det tilføjede propan-2-ol ved $n = \frac{m}{M}$

$$n(\text{propan-2-ol}) = \frac{2,903 \text{ g}}{60,10 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,0483 \text{ mol}$$

Altså er der tilføjet 0,0483 mol propan-2-ol til opløsningen

Jeg kan nu udregne stofmængdekonzentrationen ved $c = \frac{n}{V}$

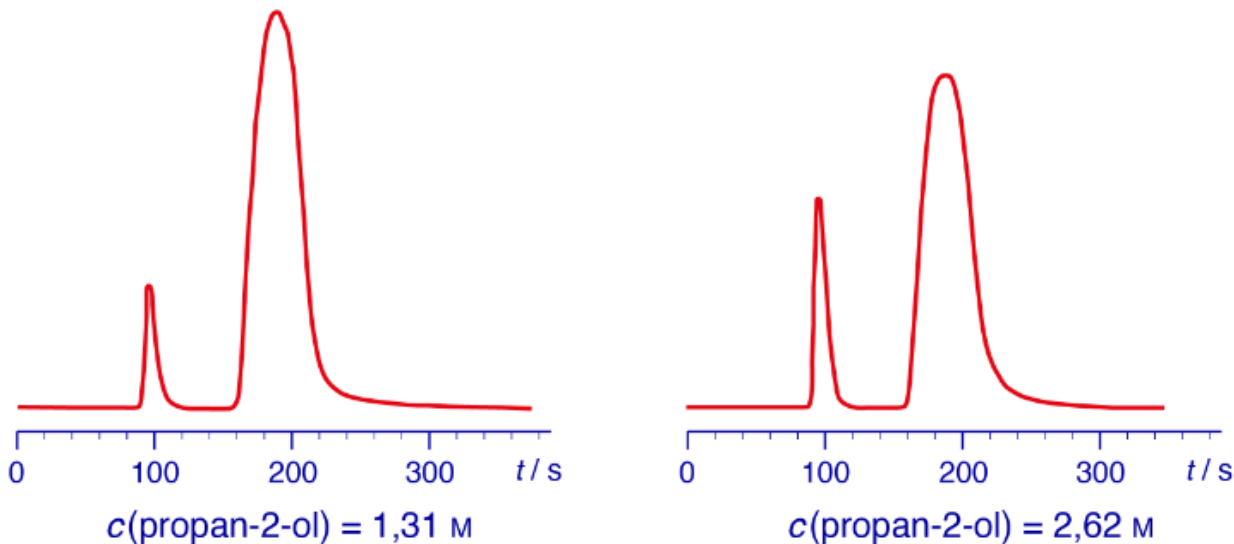
$$c(\text{propan-2-ol}) = \frac{0,0483 \text{ mol}}{0,0250 \text{ L}} = 1,932 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

Altså er stofmængdekonzentrationen af propan-2-ol i standardopløsningen ca. 1,93 M

2.b

Jeg får nu at vide at 2 standardopløsninger med propan-2-ol undersøges med gaschromatografi hvor jeg får givet chromatogrammerne for de 2 standardopløsninger.

Jeg får også at vide at for hver af toppene i chromatogrammet er arealtallet proportionalt med volumenprocenten.



Figur 7 chromatogrammer for 2 standardopløsninger af propan-2-ol

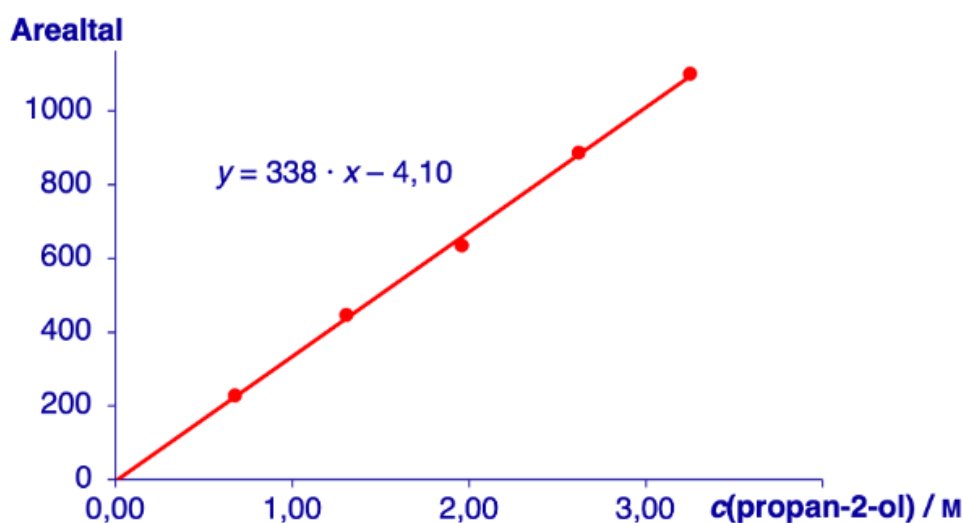
Jeg skal nu gøre rede for hvordan toppene kan tilordnes propan-2-ol og vand

Da vi får at vide at arealtallet er proportionelt med volumenprocenten, kan vi gøre brug af at der er blevet undersøgt opløsninger med forskellige koncentrationer. Hvis vi sammenligner toppene i den første chromatogram hvor koncentrationen af propan-2-ol er 1,31 M med det andet hvor koncentrationen er 2,62 M ses det at toppen ved 100 sekunder stiger mens toppen ved 200 sekunder

falder når koncentrationen af propan-2-ol øges, og når stofmængdekonzentrationen øges, vil volumenprocenten også øges og da toppenes arealtal er proportional med volumenprocenten kan toppen ved 100 sekunder tilordnes propan-2-ol og den anden top ved 200 sekunder tilordnes vand.

2.c

Jeg får nu at vide at der undersøges flere standardopløsninger med gaschromatografi hvor arealtallet for propan-2-ol bestemmes. Ud fra undersøgelsesernes data bliver der fremstillet en standardkurve som jeg får givet.



Figur 8 standardkurve for forholdet mellem arealtal og koncentrationen af propan-2-ol

Jeg får også at vide at arealtallet for propan-2-ol i brillerens er 988 samt densiteten for propan-2-ol er 0,781 g/mL ved 25 °C

Jeg skal nu bestemme indholdet af propan-2-oli brillerens.

Jeg starter med at oversætte det matematiske udtryk for standardkurven til et kemisk udtryk

$$\text{Areal} = 338 \text{ M}^{-1} \cdot c(\text{propan-2-ol}) - 4,10$$

Da jeg får givet arealtallet for propan-2-ol i brillerensen, kan jeg indsætte dette i udtrykket og løse for koncentrationen af propan-2-ol

$$988 = 338 \text{ M}^{-1} \cdot c(\text{propan-2-ol}) - 4,10$$



Ligningen løses for $c(\text{propan-2-ol})$ vha. WordMat.

$$c(\text{propan-2-ol}) = 2,935 \text{ M}$$

Jeg tager nu udgangspunkt i 1 liter brillerens og udregner massen propan-2-ol i blandingen ved $m = n \cdot M$

$$m(\text{propan-2-ol}) = 2,935 \text{ mol} \cdot 60,10 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 176,4 \text{ g}$$

Da jeg kender densiteten, kan jeg nu beregne hvor meget den givne masse af propan-2-ol fylder ved $V = \frac{m}{\rho}$

$$V(\text{propan-2-ol}) = \frac{176,4 \text{ g}}{0,781 \frac{\text{g}}{\text{mL}}} = 225,9 \text{ mL}$$

Jeg kan nu udregne volumenprocenten ved $c_{\text{volumen}\%}(A) = \frac{V(A)}{V(\text{blanding})} \cdot 100 \%$

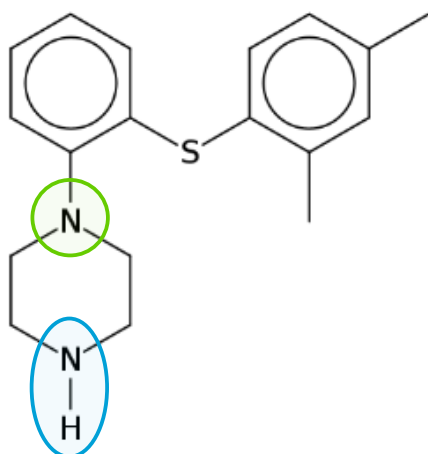
$$c_{\text{volumen}\%}(\text{propan-2-ol}) = \frac{225,9 \text{ mL}}{1000 \text{ mL}} \cdot 100 \% = 22,59 \%$$

Altså er volumenprocenten af propan-2-ol i brillerensen ca. 22,6%

Opgave 3

3.a

Jeg får givet strukturen for vortioxetin



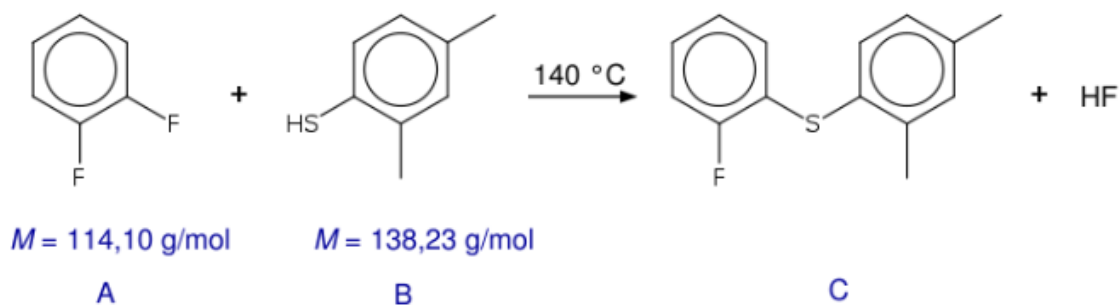
Figur 9 strukturformel for vortioxetin

Jeg skal nu markere aminogrupperne og angiver hvorvidt de primære, sekundære eller tertiære.

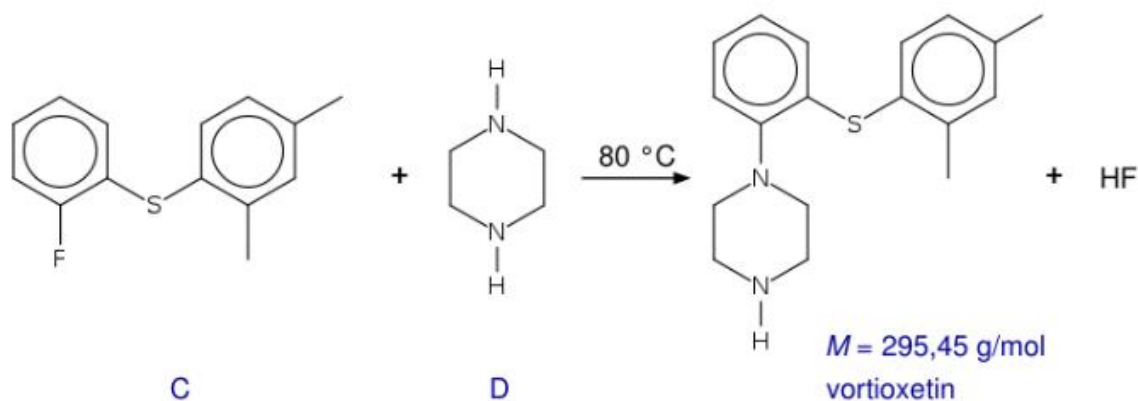
Jeg ved at det der definerer hvorvidt en aminogruppe er primær, sekundær eller tertiær er antallet af hydrogenatomer der sidder bundet til nitrogenatomet. Jeg ser at i strukturen er der et nitrogen uden nogle hydrogenatomer og denne aminogruppe er derfor tertiær og jeg markerer den med grøn. Det andet nitrogenatom har 1 hydrogenatom bundet til sig og aminogruppen er derfor sekundær og jeg markerer denne med blå.

3.b

Jeg får nu at vide at vortioxetin fremstilles ud fra 2 del reaktioner, og jeg får givet reaktionsskemaer for de 2 reaktioner samt udgangsstoffernes molarmasser.



Figur 10 reaktion 1 i fremstillingen af vortioxetin



Figur 11 reaktion 2 i fremstillingen af vortioxetin

Jeg får også at vide at under en fremstilling af vortioxetin fremstilles der ud fra 228 mg af stof A, 138 mg af stof B og et overskud af stof D 136 mg vortioxetin.

Jeg skal nu beregne udbyttet vortioxetin i procent af det teoretisk mulige.

Jeg starter med at betragte reaktionsskemaerne og ser at vortioxetin og stof C er i forholdet 1:1 samt at både stof A og stof B er i forholdet 1:1 med stof C.

Jeg beregner derfor stofmængderne af de tilsatte masser stof A og B for at finde den begrænsende faktor. Til dette bruger jeg formelen $n = \frac{m}{M}$

$$n(A) = \frac{228 \text{ mg}}{114 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 2,00 \text{ mmol}$$

$$n(B) = \frac{138 \text{ mg}}{138,23 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,9983 \text{ mmol}$$

Da stofmængden af stof B er den laveste vil dette være den begrænsende faktor i reaktionen. Jeg ved også at stof B er i forholdet 1:1 med stof C som er i forholdet 1:1 med vortioxetin og derfor er stof B også i forholdet 1:1 med vortioxetin. Altså kan der teoretisk set dannes en lige så stor stofmængde vortioxetin som der anvendes stof B altså ca. 0,998 mmol.

Jeg udregner nu massen af den teoretisk mulige mængde vortioxetin ved $m = n \cdot M$

$$m(\text{vortioxetin}) = 0,998 \text{ mmol} \cdot 295,45 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 294,9 \text{ mg}$$

Altså kan der teoretisk set fremstilles 294,4 mg vortioxetin ud fra de anvendte mængder af reaktanter.

Jeg udregner nu udbytteprocenten ved $\text{udbytte}_{\%} = \frac{\text{udbytte}}{\text{teoretisk udbytte}} \cdot 100 \%$

$$\text{udbytte}_{\%}(\text{vortioxetin}) = \frac{136 \text{ mg}}{294,9 \text{ mg}} \cdot 100 = 46,12 \%$$

Altså er der blevet fremstillet ca. 46,1% af de teoretisk mulige vortioxetin.

3.c

Jeg får nu at vide at nedbrydningen af vortioxetin i mennesker er blevet undersøgt hvor 18 mænd indtog 10 mg vortioxetin, og får givet en excel-fil der viser data over koncentrationen af vortioxetin i deres blod til tiden efter indtagelsen.

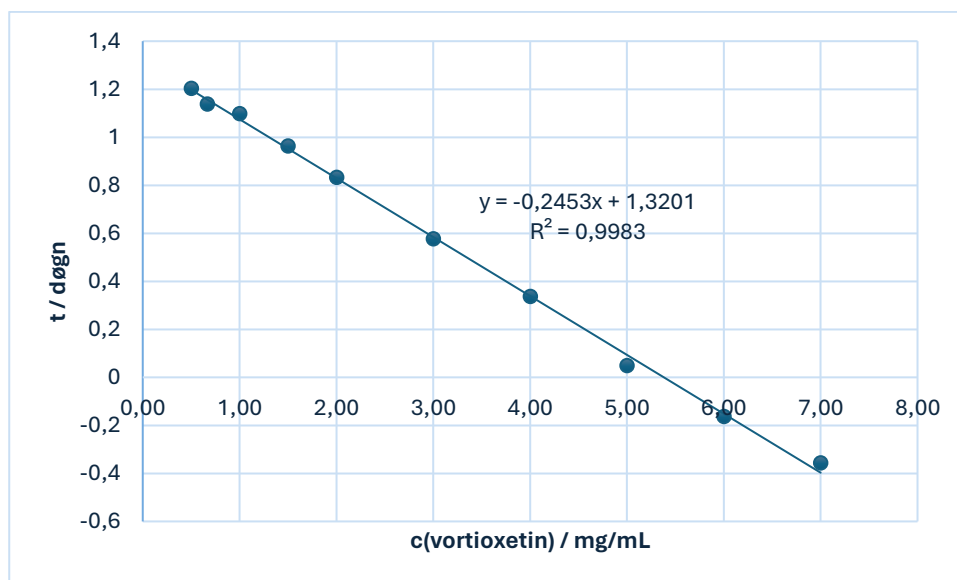
$t/\text{døgn}$	$c(\text{vortioxetine})/(\text{mg/mL})$
0,083	0,60
0,17	1,70
0,25	3,45
0,50	3,33
0,67	3,12
1,0	3,00
1,5	2,62
2,0	2,30
3,0	1,78
4,0	1,40
5,0	1,05
6,0	0,85
7,0	0,70

Tabel 2 data for nedbrydningen af vortioxetin

Jeg skal nu vise at nedbrydningen er af 1. orden med hensyn til vortioxetin efter den maksimale koncentration er opnået samt bestemme halveringstiden.

Jeg starter med at se at den maksimale koncentration der opnås, er 3,45 mg/mL efter 0,25 døgn. Jeg kigger derfor kun på data efter dette tidspunkt.

Da jeg skal vise at det er en 1. ordensreaktion tager jeg naturlige logaritme til koncentrationen af vortioxetin og afbilder den som funktion af tiden da hvis det er en 1. ordensreaktion vil dette give en ret linje som er nem at identificere.



Figur 12 afbildning af $\ln[\text{vortioxetin}]$ som funktion af tiden

Her ses det at grafen følger en pæn ret linje med en god forklaringsgrad og ingen systematiske afvigelser i residualerne, og derfor kan nedbrydningen af vortioxetin godt siges at være af 1. orden efter den maksimale koncentration er opnået.

For at bestemme halveringstiden kan jeg bruge formelen $T_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln(2)}{k}$ da jeg kan aflæse hastighedskonstanten som den negative hældningskonstant altså $k = -a$

$$k = -(-0,2453) = 0,2453$$

Jeg kan nu beregne halveringstiden

$$T_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln(2)}{0,2453} = 2,826$$

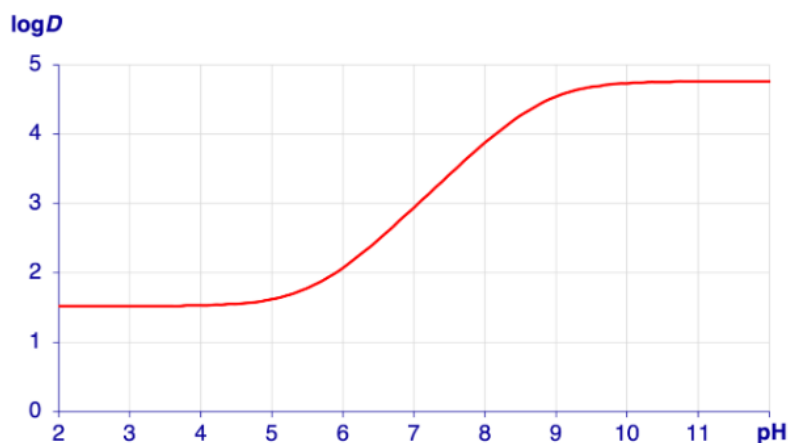
Altså er halveringstiden ca. 2,8 døgn.

3.d

Jeg får nu at vide pK_b for vortioxetin er 5,17 samt at fordelingsforholdet for vortioxetin er givet ved

$$D = \frac{c_{\text{vortioxetin}}(\text{octan-1-ol})}{c_{\text{vortioxetin}}(\text{aq})}$$

Jeg får også givet en graf der viser logD for vortioxetin som funktion af pH i vandfasen.



Figur 13 graf for logD for vortioxetin som funktion af pH i vandfasen

Jeg skal nu forklare ændringen i D når pH ændres fra 2 til 12.

Jeg starter med at omregne pK_b til pK_s ved $pK_s = 14 - pK_b$

$$pK_s = 14 - 5,17 = 8,83$$

Hvis vi betragter strukturen, kan vi se at stoffet har relativt mange hydrofobe grupper hvilket gør at størstedelen af stoffet vil opløses i den upolære fase som også ses ud fra logD grafen. Det er forårsaget af ændringen i D ved ændring af pH er den sekundære aminogruppe som har syre base egenskaber, og den kan optage et hydron, hvilket den begynder at gøre når pH kommer under 9. Når aminogruppen optager et hydron bliver den positivt ladet hvilket er med til at gøre molekylet meget mere polært og hydrofilt hvilket gør at mere af stoffet vil opløses i vandfasen. Altså fordi vortioxetin er en svag base vil den ved lave pH værdier være på syreform hvor det har optaget et hydron og bliver derved meget mere vandopløseligt.

Opgave 4

4.a

Jeg skal opskrive den kemiske formel for magnesiumnitrat.

Jeg starter med at opskrive de 2 ioner der danner saltet.

Magnesiumion: Mg^{2+}

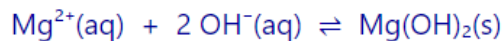
Nitrat: NO_3^-

Da ladningen skal være neutral på det samlede salt, skal der 2 nitrat til at danne saltet.

Altså bliver formelen $Mg(NO_3)_2$

4.b

Jeg får nu givet reaktionsskemaet for fældningen af magnesiumhydroxid



Figur 14 fældningen af magnesiumhydroxid

Jeg skal nu gøre rede for hvilken retning ligevægten forskydes når pH sænkes.

Hvis pH sænkes, vil der opstå flere oxoniumioner som vil reagere med hydroxidionerne hvor de afgiver deres hydron således at $\text{H}_3\text{O}^{+} + \text{OH}^{-} \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ altså hvis pH sænkes vil mængden af hydroxidioner falde og ifølge Le Chateliers princip så vil et indgreb i en ligevægt forskyde ligevægten i den retning som mindsker indgrebets effekt. Altså vil ligevægten forskydes mod venstre, så der dannes flere hydroxidioner og mindre magnesiumhydroxid, hvis pH sænkes.

4.c

Jeg får nu at vide at det udfældede magnesiumhydroxid opvarmes til 750 °C hvorefter følgende ligevægt indstilles



Figur 15 ligevægten ved opvarmningen af magnesiumhydroxid

Jeg skal nu beregne ΔH° og ΔS° for reaktionen og kommentere resultatet i forhold til reaktionsskemaet.

Jeg ved at ændringen i standardenthalpien kan beregnes ved at trække summen af reaktanternes standard enthalpi fra summen af produkternes. Det samme er sandt for ændringen i standard entropi blot udskiftet med entropi i stedet for enthalpi.

Altså får jeg følgende udtryk

$$\Delta H^{\circ} = \left(H^{\circ}(\text{MgO}(\text{s})) + H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) \right) - H^{\circ}(\text{Mg}(\text{OH})_2(\text{s}))$$

$$\Delta S^{\circ} = \left(S^{\circ}(\text{MgO}(\text{s})) + S^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) \right) - S^{\circ}(\text{Mg}(\text{OH})_2(\text{s}))$$

Jeg finder nu de relevante termodynamiske data i en databog

$$H^{\circ}(\text{MgO}(\text{s})) = -601,60 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$S^{\circ}(\text{MgO}(\text{s})) = 26,95 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$H^{\circ}(\text{H}_2\text{O}(\text{g})) = -241,8 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$S^{\circ}(H_2O(g)) = 188,8 \frac{J}{mol \cdot K}$$

$$H^{\circ}(Mg(OH)_2(s)) = -924,5 \frac{kJ}{mol}$$

$$S^{\circ}(Mg(OH)_2(s)) = 63,2 \frac{J}{mol \cdot K}$$

Jeg kan nu indsætte de termodynamiske data i de 2 udtryk.

$$\Delta H^{\circ} = \left(\left(-601,60 \frac{kJ}{mol} \right) + \left(-241,8 \frac{kJ}{mol} \right) \right) - \left(-924,5 \frac{kJ}{mol} \right) = 81,1 \frac{kJ}{mol}$$

$$\Delta S^{\circ} = \left(26,95 \frac{J}{mol \cdot K} + 188,8 \frac{J}{mol \cdot K} \right) - 63,2 \frac{J}{mol \cdot K} = 152,6 \frac{J}{mol \cdot K}$$

Altså er $\Delta H^{\circ} = 81,1 \frac{kJ}{mol}$ og $\Delta S^{\circ} = 152,6 \frac{J}{mol \cdot K}$

Da $\Delta H^{\circ} > 0$ er reaktionen mod højre endoterm hvilket vil sige at hvis temperaturen hæves vil ligevægten forskydes længere mod højre. Da $\Delta S^{\circ} > 0$ vil det sige at der dannes mere uorden dette kan forklares ved at kigge på reaktionsskemaet hvor der mod højre omdannes et enkelt partikel til 2 andre partikler hvoraf et af dem er et gas partikel.

4.d

Jeg får nu at vide at reaktionen gennemføres normalt ved 750 °C hvor reaktionen forløber næsten fuldstændigt.

Jeg skal nu beregne den laveste temperatur hvor reaktionen kan forløbe spontant når partialtrykket af vand er 0,030 bar.

Til dette starter jeg med at opstille et udtryk for ændringen i molar standard Gibbs-energi fra formelsamlingen

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

Her indsætter jeg mine værdier for reaktionen

$$\Delta G^{\circ} = -152,6 \frac{J}{mol \cdot K} \cdot T + 81100 \frac{J}{mol}$$

Jeg skal nu have omregne dette til ΔG og til dette bruger jeg udtrykket.

$$\Delta G = \Delta G^{\circ} + R \cdot T \cdot \ln(Y)$$

Jeg skal derfor også bestemme reaktion reaktionsbrøken og her ved jeg at partialtrykket af vand er 0,030 bar og da de andre 2 stoffer der indgår i reaktionen, er faste stoffer indgår de ikke i reaktionsbrøken og reaktionsbrøken bliver derfor bare.

$$Y = 0,030 \text{ bar}$$

Jeg kan nu samle et udtryk hvor den eneste variabel er temperaturen.

$$\Delta G = \left(-152,6 \frac{J}{mol \cdot K} \cdot T + 81100 \frac{J}{mol} \right) + 8,31 \frac{J}{mol \cdot K} \cdot T \cdot \ln(0,030)$$

Jeg sætter udtrykket lig 0 og løser for den absolutte temperatur.

$$0 = \left(-152,6 \frac{J}{mol \cdot K} \cdot T + 81100 \frac{J}{mol} \right) + 8,31 \frac{J}{mol \cdot K} \cdot T \cdot \ln(0,030)$$



Ligningen løses for T vha. WordMat.

$$T = 446,2 \text{ K}$$

Jeg omregner nu den absolutte temperatur til celsius ved $t = (T - 273,15)^\circ\text{C}$

$$t = (446,2 - 273,15)^\circ\text{C} = 173,1^\circ\text{C}$$

Altså er den laveste temperatur som reaktionen spontant kan forløbe ved, når partialtrykket af vand er 0,030 bar, ca. 173 grader celsius