

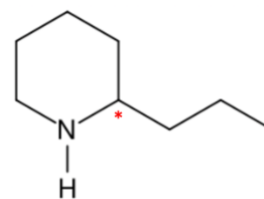
Elevbesvarelse skriftlig eksamen 28. maj 2024

Opgave 1: Kødædende planter

a) *Gør rede for, at coniin udviser stereoisomeri.*

Coniin udviser spejlbilledisomeri, da det indeholder et asymmetrisk carbon-atom, der er markeret med * på figuren.

Carbon-atomet er asymmetrisk, da det har bundet 4 forskellige atomer / atomgrupper bundet.



coniin

b) *Beregn pH i den mættede vandige opløsning af coniin.*

Da pK_b for coniin er 2,82 er coniin en ikke-stærk base.

For en opløsning af en ikke-stærk base beregnes $[OH^-]$

$$10^{pK_b} m = \frac{[OH^-]^2}{c_b - [OH^-]}$$

Jeg løser ligningen i wordmat, hvor jeg erstatter $[OH^-]$ med x.

$$10^{-2,82} = \frac{x^2}{0,067 - x}$$

⇕

$$x = -0,01085536 \quad \vee \quad x = 0,0093418$$

Da koncentrationen ikke kan være negativ fås

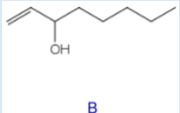
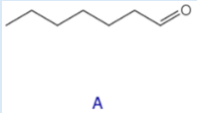
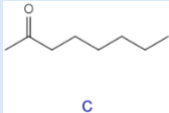
$$[OH^-] = 0,0093418 \text{ m}$$

$$pH = 14 - pOH = 14 + \log([OH^-]) = 14 + \log(0,0093418) = 11,97$$

Dvs. pH i den mættede opløsning af coniin er 12,0

c) *Argumenter for, hvilke af reagensglassene der kan tilordnes stofferne på baggrund af de kemiske tests vist i filmen.*

Resultaterne fra de kemiske tests er vist nedenfor i tabel.

Reagensglas	1	2	3
Br ₂	+	-	-
2,4-DNP	-	+	+
Fehling	-	+	-
Tilordning	 B	 A	 C

Stof B er en alken, der reagerer med bromvand i en additionsreaktion. **Stof B er i glas 1**

Stof A er et aldehyd, der reagerer positivt med både 2,4-DNP (påvisning af carbonyl) og Fehlings væske (påvisning af aldehyd). **Stof A er i glas 2**

Stof C er en keton, der kun reagerer positivt med 2,4-DNP (påvisning af carbonyl). **Stof C er i glas 3**

d) *Bestem strukturformlen for X-gruppen i stof D. Argumenter ud fra IR-spektret og ^1H -NMR-spektret. I IR-spektret inddrages absorptionsbånd over 1500 cm^{-1} . I ^1H -NMR-spektret inddrages integralforhold, kemiske skift og koblingsmønstre, idet signalerne i spektret tilordnes X-gruppens strukturformel*

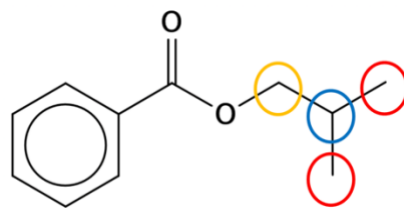
IR:

$\bar{\nu} / \text{cm}^{-1}$	intensitet	tilordning	Tabelværdi / cm^{-1}
3100	Svagt	sp^2 -hybridiseret C-H stræk	3100 - 3100
3000-2900	medium	sp^3 -hybridiseret C-H stræk	3000 - 2800
1710	stærkt	C=O stræk	1745 - 1715
1600-1575	Svagt	C=C i aromat	1600 - 1575

Dvs. der er et carbonylbånd. Det kan være en ester eller en keton, men ikke et aldehyd, da der ikke er noget C-H stræk fra CHO-gruppen eller en carboxylsyre, da der ikke er et O-H stræk.

^1H -NMR

δ / ppm	Integral	Koblingsmønster	tilordning
4,12	2	Dublet	$\text{COO-CH}_2\text{-CH}$
2,08	1	Nonet	$\text{CH}_2\text{-CH(CH}_3)_2$
0,95	6	Dublet	$\text{CH(CH}_3)_2$



Signalerne i ^1H -NMR kan kun kombineres på én måde. Estergruppen skal vende, så oxygenatomet vender ind mod methylen-gruppen. Det fremgår af det kemiske skifte på 4,12 ppm.

X-gruppen er $\text{COO-CH}_2\text{-CH(CH}_3)_2$

Opgave 2: Brillerens

a) *Beregn stofmængdekonzentrationen af propan-2-ol i den fremstillede standardopløsning.*

Der afvejes 2,903 g propan-2-ol og der overføres til 25 mL målekolbe og fyldes op til strengen med vand.

Stofmængden og koncentrationen af propan-2-ol bestemmes.

$$M(\text{propan-2-ol}) = 60,10 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$$

$$n(\text{propan-2-ol}) = \frac{m(\text{propan-2-ol})}{M(\text{propan-2-ol})} = \frac{2,903 \text{ g}}{60,10 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,04830283 \text{ mol}$$

$$c(\text{propan-2-ol}) = \frac{n(\text{propan-2-ol})}{V} = \frac{0,04830283 \text{ mol}}{0,0250 \text{ L}} = 1,932113 \frac{\text{mol}}{\text{L}}$$

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

b) *Gør rede for, hvordan toppene i chromatogrammerne kan tilordnes propan-2-ol og vand.*

Arealet under kurven (arealtallet) er proportionalt med volumenprocenten. Det betyder, at toppen ved 100 s kan tilskrives propan-2-ol, da denne top vokser, når koncentrationen fordobles fra 1,31 m til 2,62 m. Den anden top ved 200 min tilskrives vand.

c) Bestem indholdet af propan-2-ol i Brillerens. Angiv resultatet i volumenprocent.

Arealtallet sættes ind på ys plads i ligningen, da arealtallet afbildes som funktion af koncentrationen. x er den formelle koncentration af propan-2-ol.

$$988 = 338 \cdot x - 4,10. \quad \text{dvs. } x = 2,935207$$

Dermed er koncentrationen 2,94 M

Der regnes nedenfor på 1,00 L opløsning

$$n(\text{propan-2-ol}) = c \cdot V = 2,935 \text{ M} \cdot 1,00 \text{ L} = 2,935 \text{ mol}$$

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

$$V = \frac{m}{\rho} = \frac{176,4 \text{ g}}{0,789 \frac{\text{g}}{\text{mL}}} = 224 \text{ mL}$$

$$c_{\text{vol}}\%(\text{propan-2-ol}) = \frac{V(\text{propan-2-ol})}{V_{\text{total}}} = \frac{224 \text{ mL}}{1000 \text{ mL}} = 22,4 \%$$

Indholdet af propan-2-ol i brillerens er altså 22,4 vol%

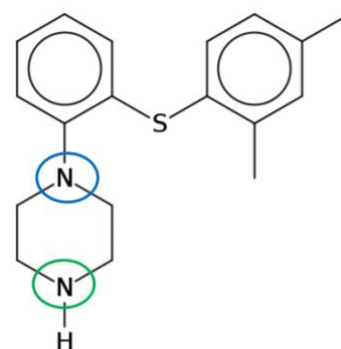
Opgave 3: Vortioxetin - et lægemiddel dannet ved klik-kemi

a) Marker aminogrupeerne i vortioxetin, og angiv for hver gruppe, om den er primær, sekundær eller tertiær.

Der er to aminogrupeer i vortioxetin. De er markeret i figuren.

Gruppen markeret med blå er tertiær

Gruppen markeret med grønt er sekundær



vortioxetin

b) Beregn udbyttet af vortioxetin i procent af det teoretisk mulige.

Stofmængderne af A og B bestemmes

$$n(A) = \frac{m(A)}{M(A)} = \frac{0,228 \text{ g}}{114,10 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 0,001998247 \text{ mol}$$

$$n(B) = \frac{m(B)}{M(B)} = \frac{0,138 \text{ g}}{138,23 \frac{\text{g}}{\text{mol}}} = 9,983361 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

Stof B er den begrænsende reaktant, da stofmængden af B er mindre end stofmængden af A, og A og B reagerer 1:1.

Alle stoffer reagerer 1:1 og der er tilsat overskud af D, så det teoretiske udbytte af vortioxetin kan beregnes ud fra stofmængden af B.

$$m(\text{vortioxetin})_{\text{teori}} = n(\text{vortioxetin})_{\text{teori}} \cdot M(\text{vortioxetin}) = 0,998 \text{ mol} \cdot 295,45 \frac{\text{g}}{\text{mol}} = 295 \text{ mg}$$

$$\text{udbytte \%} = \frac{m(\text{vortioxetin})}{m(\text{vortioxetin})_{\text{teori}}} = \frac{136 \text{ mg}}{295 \text{ mg}} = 46,1 \%$$

Dvs. udbyttet er 46,1 % af det teoretisk mulige.

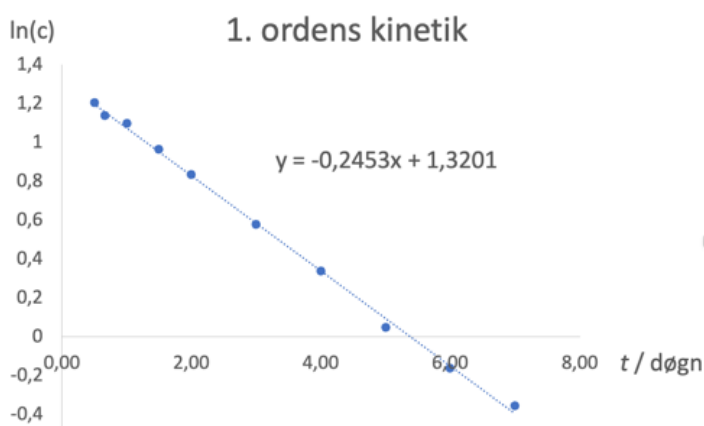
c) *Vis, at nedbrydningen af vortioxetin er af 1. orden med hensyn til vortioxetin, efter den maksimale koncentration af vortioxetin er opnået. Bestem halveringstiden.*

1. ordens kinetik eftervises i et $(t, \ln(c))$ -plot fra efter maksimalkoncentration er opnået. I den lineære regression ligger punkterne tæt ved linjen og uden systematisk afvigelse.

Hastighedskonstanten aflæses som minus hældningskoefficient-en i afbildningen.

$$k = 0,2453 \text{ døg}^{-1}$$

$$T_{\frac{1}{2}} = \frac{\ln(2)}{k} = \frac{\ln(2)}{0,2453 \text{ døg}^{-1}} = 2,83 \text{ døg}$$



Halveringstiden er 2,83 døg.

d) *Forklar ændringen i D for vortioxetin, når pH ændres fra 2 til 12. Inddrag både strukturen af vortioxetin-molekylet i figur 3.3 og stoffets syre-baseegenskaber.*

Vortioxetin er overordnet set et hydrofobt molekyle, da det indeholder 2 benzenringe og adskillige upolære CH-grupper.

I molekylet findes kun én polær binding, N-H bindingen nederst i molekylet. Når molekylet er uladet, er det derfor mest opløseligt i den upolære octan-1-ol-fase og $\log D$ er derfor større end nul.

Vortioxetin er dog en base, dvs. ved lave pH-værdier, hvor pH er noget mindre end pK_s vil stoffet have optaget en hydron og være på positivt-ladet form. Det er derfor relativt mindre opløseligt i octan-1-ol ved lav pH, da det her er på ion-form.

Ved lav pH, når pH er mindre end 5 er vortioxetin på den ladede syreform og relativt mere opløseligt i vand end når pH er højere end 9, hvor stoffet er på den uladede baseform og mere opløseligt i octan-1-ol.

Opgave 4: Nanopartikler til vandrensning

a) *Opskriv den kemiske formel for magnesiumnitrat.*

Formlen for magnesiumnitrat er $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$

b) Gør rede for, i hvilken retning ligevægten i figur 4.1 forskydes, hvis pH sænkes.

Hvis pH sænkes falder koncentrationen af hydroxid.

Ifølge Le Chateliers princip forskydes ligevægten i den retning, der modvirker indgrebet.

Der vil derfor ved pH sænkning ske en forskydning til venstre, hvor der dannes hydroxid.

c) Beregn ΔH° og ΔS° for reaktionen vist i figur 4.2. Kommenter resultaterne i forhold til reaktionsskemaet.

$$\Delta H^\circ = H^\circ(\text{MgO(s)}) + H^\circ(\text{H}_2\text{O(g)}) - H^\circ(\text{Mg(OH)}_2\text{(s)}) = (-601,60 - 241,8 - (-924,5)) \frac{\text{kJ}}{\text{mol}} = 81,1 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$$

$$\Delta S^\circ = S^\circ(\text{MgO(s)}) + S^\circ(\text{H}_2\text{O(g)}) - S^\circ(\text{Mg(OH)}_2\text{(s)}) = (26,95 + 188,8 - 63,2) \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}} = 152,55 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$$

ΔH° for reaktionen er 81,1 kJ/mol og ΔS° er 152,55 J/(mol·K)

Reaktionen er endoterm, da tilvæksten i standardenthalpi er positiv. Ved reaktionen dannes et fast stof og et gasformigt molekyle ud fra et fast stof. Herved øges uordenen, og tilvæksten i standardentropi er positiv.

d) Beregn den laveste temperatur, hvor reaktionen i figur 4.2 kan forløbe spontant, når partialtrykket af vand er 0,030 bar.

Vi skal løse uligheden $\Delta G < 0$, når partialtrykket af vand er 0,030 bar. Dvs.

$$\Delta G^\circ + R \cdot T \cdot \ln(Y) < 0$$

$$\Delta H^\circ - T \cdot \Delta S^\circ + R \cdot T \cdot \ln(p(\text{H}_2\text{O})) < 0$$

Uligheden løses i wordmat

$$81100 \frac{\text{J}}{\text{mol}} - T \cdot 152,55 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}} + 8,31 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}} \cdot T \cdot \ln(0,030) < 0$$

$$T > 446,37 \text{ K}$$

Den laveste temperatur, hvor reaktionen kan forløbe spontant med et partialtryk på 0,030 bar er 173 °C.