

ALKOHOLER, CARBOXYLSYRER, ESTERE, KONDENSATION OG HYDROLYSE

Inden vi ser nærmere på to ny reaktionstyper, som hedder kondensation og hydrolyse, skal vi i lidt nærmere detalje betragte alkoholars og carboxylsyrers opbygning og navngivning. Vi har allerede set på alkoholer og carboxylsyrer tidligere, men lidt gentagelse skader jo aldrig.

Alkohol - en stofklasse

Det er kendt for os, at når vi introducerer en $-OH$ gruppe, som er en funktionel gruppe, i et carbonhydrid tilføjer man *suffikset*¹ -ol til carbonhydridets navn, og man har en alkohol. De simpleste alkoholer er således nedenstående, hvor det øverste navn er IUPAC-navnet.

(International Union of Pure and Applied Chemistry).

CH_3OH
methanol
(methylalkohol)

CH_3CH_2OH
ethanol
(ethylalkohol)

$CH_3CH_2CH_2OH$
propan-1-ol
(propylalkohol)

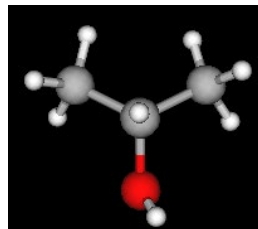
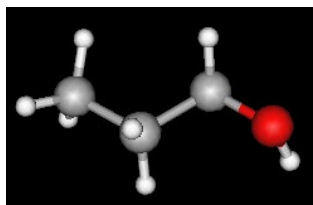
$CH_3CHOHCH_3$
propan-2-ol
(isopropylalkohol)

Spørgsmål: Giver IUPAC-navnene mening for jer? Tegn propan-2-ol med zigzagformel på et stykke papir.

Methanol er kendt som træsprit mens ethanol er kendt som sprit eller blot alkohol.

Som vi ser, er det nødvendigt at angive placeringen af $-OH$ gruppen ved nummerering - husk på at vi tidligere har talt om *stillingsisomeri*. Nedenfor vises eksempler på molekylmodeller af to alkoholer.

Spørgsmål: Hvilke alkoholer er dette? Er de stillingsisomerer?

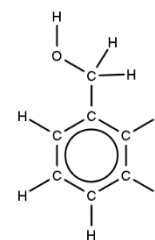


Man kan have **dioler** og **triole**.

Spørgsmål:

- Hvad mon man mener med en **diol** eller en **triol**?

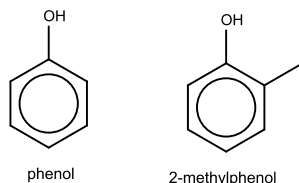
Aromatiske alkoholer (husk her på benzen) eksisterer naturligvis også. Her til højre vises *phenylmethanol* (det er IUPAC-navnet), der også er kendt som benzylalkohol.



¹ Suffikset står i slutningen af navnet.

Phenol - en stofklasse

En phenol indeholder en hydroxygruppe (–OH gruppe), der er bundet *direkte* til en aromatisk ring:

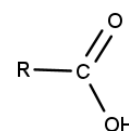


Phenol har syre-baseegenskaber. Syre-baseegenskaberne for phenol vender vi tilbage til i 2g, men bemærk det allerede nu. Phenol er *ikke* at betragte som en alkohol som fx ethanol.

Carboxylsyre - en stofklasse

... og mere om syrer og baser

Generelt ser en carboxylsyre ud som vist her til højre. R betegner et radikal, det kan fx være en alkylgruppe som ethyl eller propyl.



Man kan mere kompakt skrive det som R-COOH eller RCOOH.

Eddikesyre - kendt fra en tidligere øvelse - er et eksempel på en carboxylsyre.

Eddikesyre er det samme som ethansyre.

Man benytter *suffikset* -syre ved navngivning:

HCOOH
methansyre
(myresyre)

CH₃COOH
ethansyre
(edikesyre)

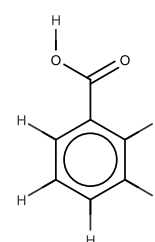
CH₃CH₂COOH
propansyre
(propionsyre)

CH₃CH₂CH₂COOH
butansyre
(smørsyre)

Spørgsmål: Kan I umiddelbart forstå IUPAC-navnene? Det er navnene, der ikke står i parentes. Tegn ethansyre med alle bindingsstreger.

Den funktionelle gruppe her er carboxylgruppen, som er -COOH. Noter, at suffikset -syre i navnet kun omfatter OOH. Bruger man COOH ved navngivning, skal endelsen være carboxylsyre. Man *kan* altså navngive med suffikset carboxylsyre.

Et eksempel på det ses til højre, hvor navnet benzencarboxylsyre kan bruges, men vi benytter **benzoesyre**. **Hvor er carboxylgruppen?**



Man kan have **dicarboxylsyre**.

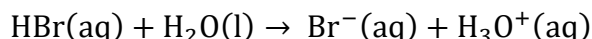
Spørgsmål: Hvad mon er karakteristisk for en dicarboxylsyre? (Vi benytter senere ofte blot ordet disyre.)

Vi ser nu nærmere på syre-basebegrebet. Følgende gælder, hvor en hydron er H^+ - hvilket er hydrogen uden en elektron - altså en proton.

En syre er et molekyle eller en ion, der kan afgive en hydron.

En base er et molekyle eller en ion, der kan optage en hydron.

Vi så på en syre-basereaktion ved forsøget med carbonhydrider, hvor der ved substitutionsreaktionen blev dannet syren HBr, som er en stærk syre. Vi skrev følgende reaktionsskema.



Her optræder vand som basen, da vand optager en hydron, som afgives af syren, som er HBr. Som man kan se, dannes der en fleratomig ion, nemlig H_3O^+ , som er opløst i vand. Navnet på denne ion er oxonium. Ionen er helt central for pH-begrebet, da følgende gælder:

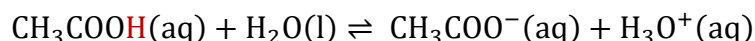
$$pH = -\log([H_3O^+])$$

Det betyder, at pH afhænger af den aktuelle stofmængdekonzentration af oxonium. Vi ser på et par eksempler:

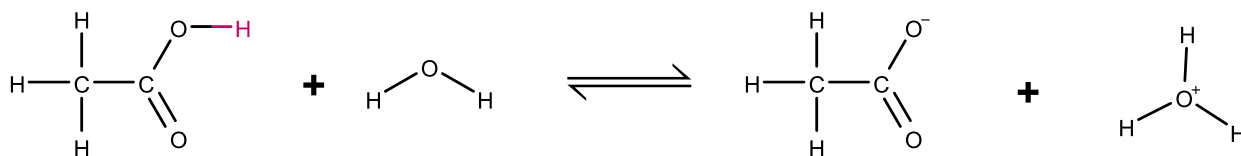
- $[H_3O^+] = 0,000100 \text{ M}$ giver os at $pH = -\log(0,0001) = 4$ ²
- $[H_3O^+] = 0,0100 \text{ M}$ giver os at $pH = -\log(0,01) = 2$

Grundet logaritmfunktionens egenskaber giver en 100 gange højere stofmængdekonzentration af oxonium kun en ændring i pH på 2.

Inden vi ser på reaktioner mellem alkoholer og carboxylsyrer, konstaterer vi, at en carboxylsyre også kan fraspalte en hydron (H^+), så der fra $RCOOH$ dannes $RCOO^-$. Reaktionen mellem ethansyre (eddikesyre) og vand ser således ud:



eller med alle bindingsstreger vist:



Reaktionspilene har I ikke set før. De omtales ofte som 'harpuner', da reaktionen kan gå begge veje! Mere om det senere.

² Bemærk at vi ved beregning blot indsætter tallet og udelader enheden.

Vigtigt: Ionen RCOO^- har suffikset *-oat*, her ser vi nogle eksempler:

HCOO^-
methanoat
(formiat)

CH_3COO^-
ethanoat
(acetat)

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-$
propanoat

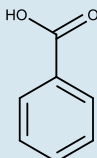
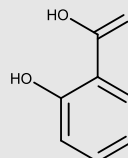
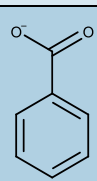
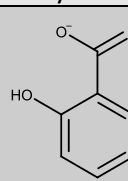
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COO}^-$
butanoat

Spørgsmål: Kan I se systematikken i ovenstående? Tegn propanoat med alle bindingsstreger.

Vi vil se meget mere i detalje på carboxylsyrerne, når vi skal studere syrer og baser i større detalje. Lige nu er det meget vigtigt, at man forstår endelsen *-oat*.

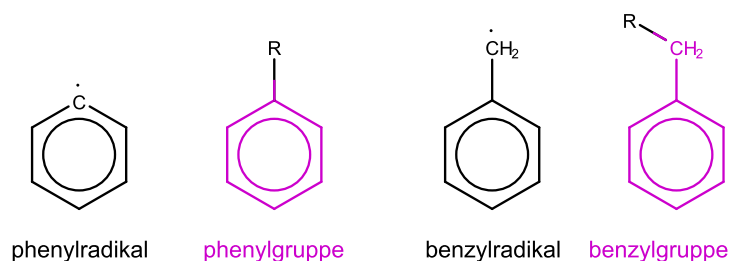
Navngivning - specielle og specielt vigtige tilfælde

Det er væsentligt at notere sig, at man i stedet for ethanoat også kan skrive acetat, for det gør man ofte i IUPAC-navngivning. Lad os dvæle ved to andre tilfælde, som I kommer til at arbejde med, og som nogle gange volder problemer i forbindelse med navngivning og endelsen *-oat*. Det drejer sig om benzoesyre og salicylsyre. IUPAC-navnet for salicylsyre er 2-hydroxybenzoesyre, men man benytter ofte navnet salicylsyre. Stoffet indgår i syntesen af acetylsalicylsyre. Det er et lægemiddel, som man fx finder i Treo. Med den viden I har nu, skal I færdiggøre nedenstående tabellen - der mangler to ord. Bemærk den negative ladning ved to af figurerne - og bemærk at farverne kobler strukturformel og navn sammen.

| | |
|---|---|
|  |  |
| benzoesyre | salicylsyre <i>eller</i> 2-hydroxybenzoesyre |
|  |  |
| Hvad mon der skal stå her? | Hvad mon der skal stå her? |

To lidt drilske grupper ved navngivning

Ved navngivning har vi tidligere tal om alkylgrupper. Det er fx methyl og ethyl eksempler på. For benzenlignende strukturer er nedenstående navne og strukturformler vigtige at kende. Mange tænker umiddelbart, at strukturen for phenyl burde hedde benzyl, men sådan er det altså ikke:



Læg mærke til at phenyl er benzen 'minus et hydrogen'. Phenylgruppen er ikke en alkylgruppe, men en *aryl*gruppe.

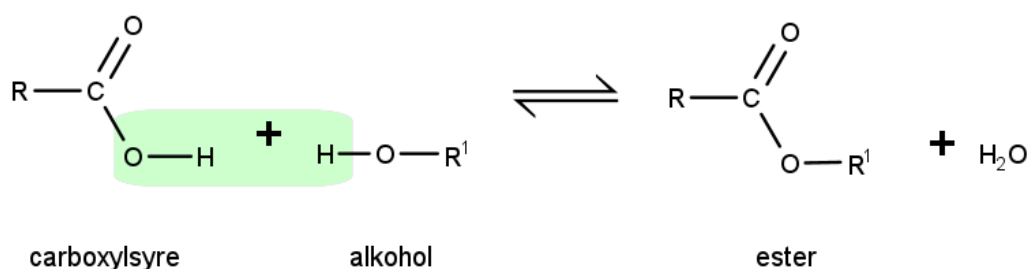
Kondensation af carboxylsyre og alkohol - dannelse af en ester - en stofklasse

Vi starter med at skrive, hvad man forstår ved en kondensation - eller en kondensationsreaktion.

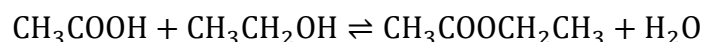
Ny reaktionstype, som man skal kende til: Kondensationsreaktion.

Ved en kondensationsreaktion sker en sammenbinding af to organiske molekyler under fraspaltning af et mindre molekyle (som ofte er vand).

Ved en kondensation af en carboxylsyre og en alkohol dannes en ester. Ved denne reaktion indstiller der sig oftest en ligevægt, som her igen er angivet med de to harpuner. De viser som skrevet tidligere, at *reaktionen* vist *kan gå i begge retninger*.

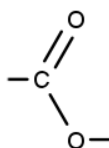


Et konkret eksempel er fremstilling af ethyl(ethanoat).



Spørgsmål (vigtigt): Hvad er systematikken i at $\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$ hedder ethyl(ethanoat)? Der er noget hjælp i farverne her! Det kan være en stor hjælp, at man tegner strukturformlerne med alle bindingsstregene af de to reaktanter og for esteren.

Her er noget hjælp: En ester indeholder estergruppen, som er tegnet nedenfor. Det er en funktionel gruppe.



Estere i naturen

Estere er kendt for ofte at have en duft af frugt. Nedenstående tabel viser nogle eksempler på dette.

Spørgsmål/opgave: Kan du forstå farvekoden nedenfor? Kan du sætte ring om de forskellige dele af strukturformlen, der hører til de to farvede dele af navnet?

| Navn | Formel | Kogepunkt | Duft |
|------------------|--|-----------|---------|
| propyl(ethanoat) | $\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ | 102°C | pære |
| octyl(ethanoat) | $\text{CH}_3\text{COO}(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$ | 211°C | citrus |
| benzyl(ethanoat) | $\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ | 216°C | jordbær |
| ethyl(butanoat) | $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOCH}_2\text{CH}_3$ | 122°C | ananas |

Spørgsmål - se på tabellen på side 6 og besvar:

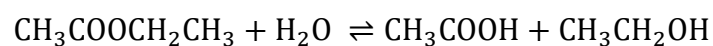
- Skriv reaktionsskemaet for fremstillingen af ethyl(propanoat).
Man skal tænke over, hvilken syre og alkohol der må reagere - altså de to reaktanter.
Skriv de kemiske formler med alle bindingsstreger eller på zigzagform.
- Skriv reaktionsskemaet for fremstillingen af propyl(ethanoat).
- Skriv reaktionsskemaet for fremstillingen af benzyl(ethanoat).

Endnu en reaktionstype: Hydrolyse

Den modsatte proces af en kondensation kaldes for *hydrolyse*:

Ved en hydrolyse sker der en spaltning af et organisk stof under vandoptagelse.

Et eksempel er hydrolysen af ethyl(ethanoat):



Opgave: Vis på en tegning med en eller flere strukturformler, hvor alle bindingsstreger er tegnet, hvor ethyl(ethanoat) spaltes.