

Eksempler på:

Argumentation

Sammenhængen mellem koncentrationen af acetylcholin og hastigheden for omdannelsen af acetylcholin kan beskrives ved nedenstående hastighedsudtryk

$$v = 0,03221 \mu\text{M} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \frac{[\text{acetylcholin}]}{[\text{acetylcholin}] + 0,24 \text{ mM}}$$

- d) Argumenter for, at hastighedsudtrykket med god tilnærmelse svarer til en 0. ordens reaktion med hensyn til acetylcholin for koncentrationer af acetylcholin over 25 mM.

I en 0.ordens reaktion er reaktionshastigheden (v) konstant

I udtrykket for v ses, at det sidste led i brøkens nævner kan negligeres, hvis [acetylcholin] er væsentlig større end 0,24 mM

Udtrykket vil så få værdien

$$v = 0,03221 \mu\text{M} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \frac{[\text{acetylcholin}]}{[\text{acetylcholin}]} = 0,03221 \mu\text{M} \cdot \text{min}^{-1}$$

- altså en konstant værdi.

Dermed er der blevet argumenteret for at der er tale om en 0.ordensreaktion

Beregning/Bestemmelse

I et laboratorium skal den molare absorptionskoefficient for permanganat i en benzenopløsning bestemmes.

Der fremstilles en stamopløsning ved at overføre 0,482 g kaliumpermanganat til en 100 mL målekolbe. Benzen med opløst A tilsættes, og der omrystes indtil alt kaliumpermanganat er opløst. Der fyldes op til mærket med benzen.

- a) Beregn den formelle stofmængdekonzentration af kaliumpermanganat i stamopløsningen.

Den formelle stofmængdekonzentration (c) kan beregnes ved

$$c = \frac{n}{V}$$

Stofmængden (n) kan findes ved at sige

$$n = \frac{m}{M}$$

Den molare masse (M) for kaliumpermanganat – KMnO_4 – findes først

$$39,098 + 54,938 + 4 \cdot 15,999 = 128,032 \text{ g/mol}$$

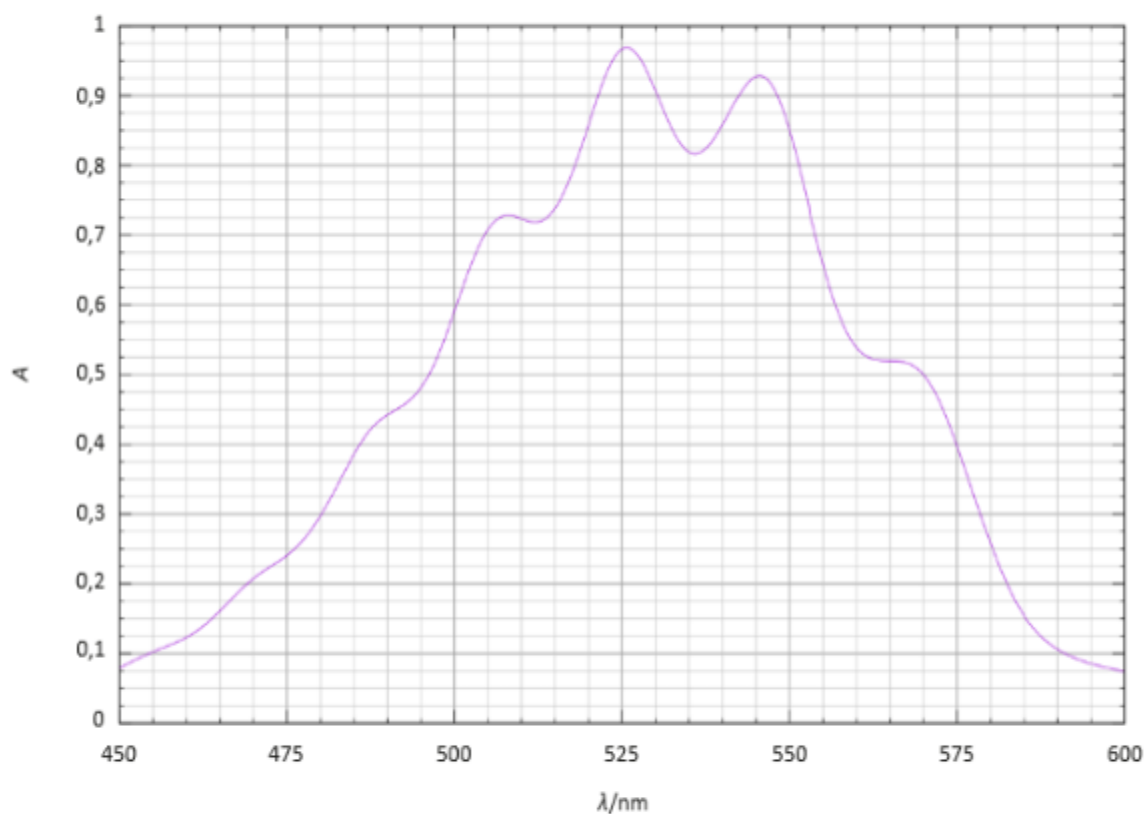
Dernæst beregnes stofmængden

$$n = \frac{m}{M} = \frac{0,482 \text{ g}}{128,032 \text{ g/mol}} = 0,00376 \text{ mol}$$

Og endeligt

$$c = \frac{n}{V} = \frac{0,00376 \text{ mol}}{0,100 \text{ L}} = \underline{\underline{0,0376 \text{ M}}}$$

1,00 mL af stamopløsningen overføres til en 100 mL målekolbe. Der fyldes op til strengen med benzen. Med et spektrofotometer optages et absorptionsspektrum af den fortyndede opløsning. Kuvettebredden er 1,00 cm. Absorptionsspektret er vist i figur 1.2.



Figur 1.2

b) Bestem den molare absorptionskoefficient, ϵ_{λ} , for MnO_4^- i benzenopløsningen ved 525 nm.

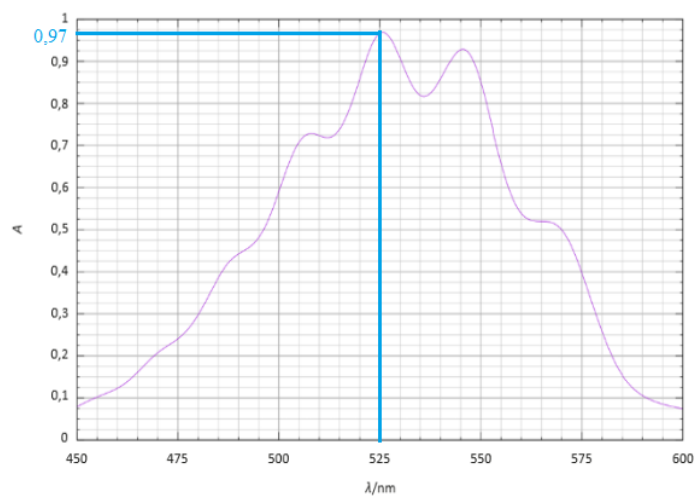
Lambert-Beers lov siger:

$$A = \epsilon_{\lambda} \cdot l \cdot [\text{farvestof}]$$

Da hver formelenhed KMnO_4 indeholder en enkelt permanganation, og da opløsningen fortyndes 100 gange gælder

$$[\text{MnO}_4^-]_{\text{kuvette}} = 0,01 \cdot c(\text{KMnO}_4) = 0,000376 \text{ M}$$

Absorbansen (A) ved 525 nm aflæses på grafen til 0,97 som vist nedenfor

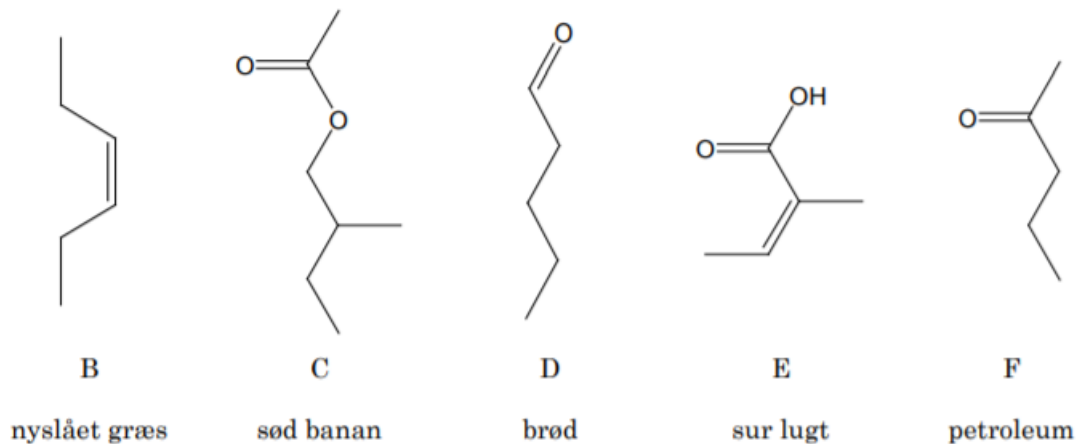


Ifølge Lambert-Beers lov er den molare ekstinktionskoefficient da

$$\varepsilon_{\lambda} = \frac{A}{l \cdot [MnO_4^-]} = \frac{0,97}{1 \text{ cm} \cdot 0,000376 \text{ M}} = \underline{\underline{2,6 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}}}$$

Forklaring:

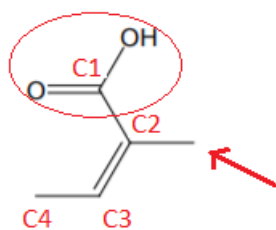
Mange forskellige aromastoffer bidrager til duften af jordbær. I figur 1.2 ses strukturformler for fem af disse aromastoffer, og hvad stofferne dufter af.



Figur 1.2

Det systematiske navn for E er (2Z)-2-methylbut-2-ensyre.

- b) Forklar den del af E's navn, der er angivet ved 2-methylbut-2-ensyre.

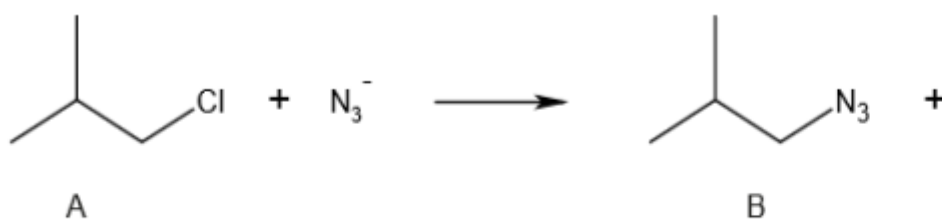


Stoffet indeholder en carboxylsyregruppe (markeret med ringen). Derfor ender navnet på syre. Den længste kæde indeholder fire carbonatomer (kaldet C1-C4). Derfra komme "but" i navnet. Der er dobbeltbinding mellem carbonatom nr. 2. og 3. Derfor "2-en". Endelig er der en methylgruppe (for enden af pilen) på carbonatom nr. 2

Opgave 3: Klik Kemi

Klik Kemi er en samlet betegnelse for en række kemiske reaktioner, der blandt andet er karakteriseret ved at foregå med højt udbytte, uden giftige biprodukter og i et vandigt miljø ved forholdsvis lave temperaturer. Klik Kemi blev introduceret omkring år 2000 blandt andet for at kunne gennemføre målrettede kemiske reaktioner inde i levende celler.

I et laboratorium fremstilles et stof B, der skal anvendes i en Klik-reaktion. B fremstilles ved reaktionen i figur 3.1

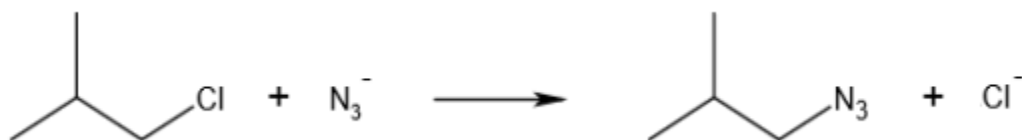


Figur 3.1

[Figur 3.1.mrv](#) [Figur 3.1.sk2](#)

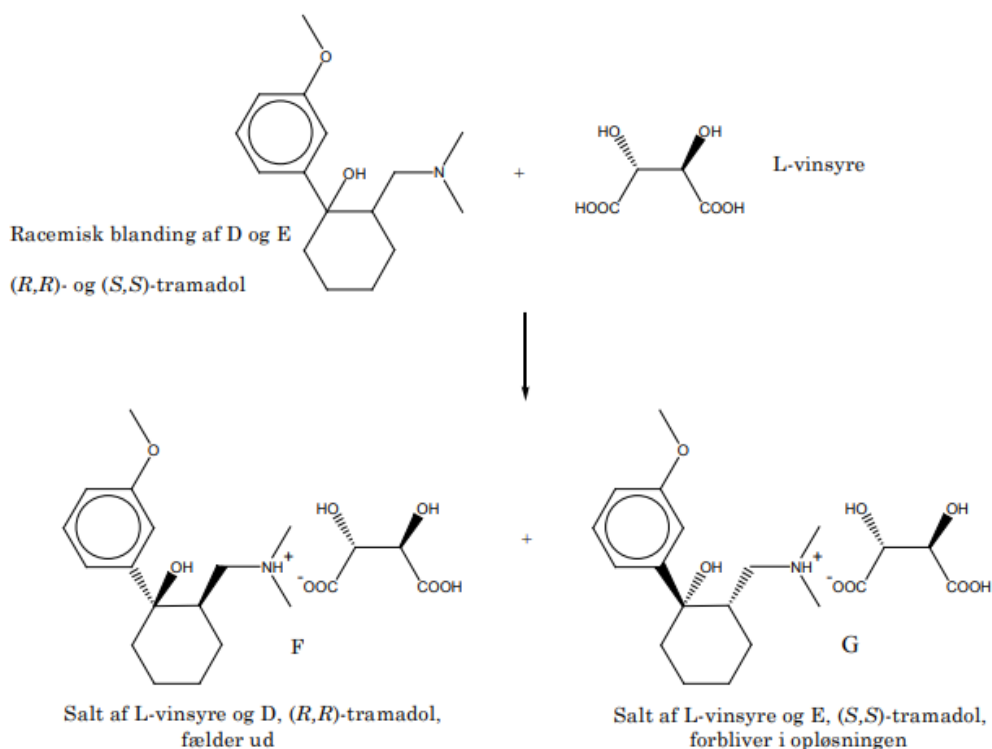
a) Færdiggør reaktionen i figur 3.1, og angiv reaktionstypen.

N_3^- ionen erstatter chlorid på udgangsstoffet. Den endelig reaktion bliver så, idet antallet af atomer og ladninger skal være bevaret:

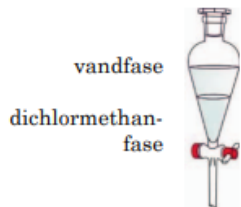


Da der udskiftes atomer, er der tale om substitution

Inddragelse



Figur 4.5



I syntesens sidste trin skal D frigøres fra saltet F. F opløses i en vandig opløsning af natriumhydroxid, hvorefter opløsningen overføres til en skilletragt. pH i den vandige opløsning er 12. Der tilsættes et upolært opløsningsmiddel, dichlormethan. Ved omrystning kan D isoleres.

- d) Argumenter for, at D frigøres fra saltet F og kan isoleres ved den beskrevne metode.
Inddrag syre-baseegenskaber samt strukturer for tramadol og L-vinsyre.

Saltet F dannes, når den basiske aminogruppe på D optager en hydron fra en carboxylsyregruppe på vinsyren. Vi får da en positiv og en negativ ion, der sammen danner det tungtopløselige salt.

Når F tilsættes den stærkt basiske NaOH-opløsning, vil tramadol afgive sin før optagne hydron til en hydroxidion. D mister derved sin positive ladning og kan ikke længere være bundet til den negative ion. Saltet F opløses derfor, og D er frigjort.

Vinsyre indeholder et stort antal polære bindinger som C-O og O-H og er i øvrigt på ionform. Den kan derfor ikke forventes at kunne opløses i den upolære dichlormethan.

Modsat indeholder D overvejende upolære bindinger som C-C og C-H. Det må derfor formodes, at stoffet kan opløses udmærket i dichlormethan - og vil søge herover ved omrystningen og således kan isoleres.

Kommentar

Blåsyre kan udvindes af frugter med kerner, fx kirsebær, abrikoser og æbler og fra bitre mandler, men det fremstilles industrielt ud fra carbonhydrider og ammoniak. Nedenfor ses reaktionsskemaet for *Degussa*-reaktionen.



b) Beregn ΔS° for reaktionen.

Kommenter resultatet i forhold til reaktionsskemaet.

De molære standardentropier slås op i Databogen

$\text{CH}_4(\text{g})$	$186,3 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$	$\text{NH}_3(\text{g})$	$192,8 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
-------------------------	---	-------------------------	---

$\text{HCN}(\text{g})$	$201,8 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$	$\text{H}_2(\text{g})$	$130,68 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$
------------------------	---	------------------------	--

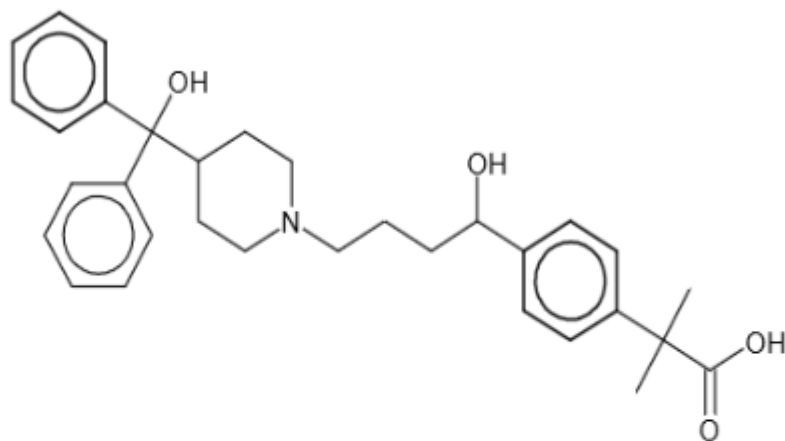
$$\Delta S^\circ = 3 \cdot 130,68 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K}) + 201,8 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K}) - (186,3 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K}) + 192,8 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K}))$$

$$= \underline{\underline{214,74 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})}}$$

Det ses, at entropiændringen er positiv. Da entropi kan tolkes som et mål for uorden, betyder det at mængden af uorden bliver større, når reaktionen forløber. Det stemmer godt overens med, at det af reaktionsskemaet fremgår, at antallet af gasmolekyler går fra to til fire. Og jo flere gasmolekyler, jo mere uorden

Markering

Strukturformlen for fexofenadin er anført i figur 4.1.



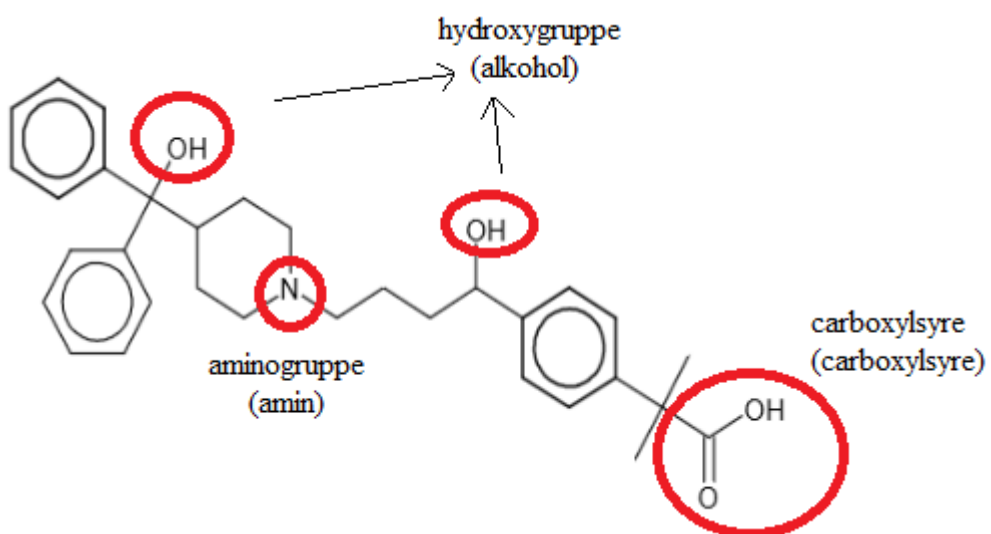
fexofenadin

$M = 501,68 \text{ g/mol}$

Figur 4.1

[Figur 4.1.mrv](#) [Figur 4.1.sk2](#)

a) Marker funktionelle grupper, og angiv, hvilke stofklasser de tilhører.



De funktionelle grupper er markeret med røde ringe og med stofklasserne angivet i parentes

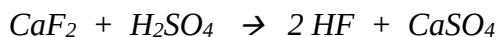
Opskrivning

Flussyre, HF, er en meget giftig og kraftigt ætsende syre. Derfor arbejder man aldrig med stoffet i gymnasieskolen. Alligevel kan kemilæreren Walther White fra Netflix-serien *Breaking Bad* hente en dunk flussyre med hjem fra skolen til at opløse et lig.



Flussyre fremstilles ved at behandle mineralet fluorit, CaF_2 , med koncentreret svovlsyre. Herved dannes hydrogenfluorid og calciumsulfat. Da flussyre ætser glas, fremstilles stoffet i en plastbeholder.

- a) Opskriv reaktionsskemaet for reaktionen mellem fluorit og svovlsyre. Tilstandsformer skal ikke anføres.



Redegørelse

Neodym findes ikke frit i naturen, da det hurtigt omdannes til neodym(3+)oxid, Nd_2O_3 .



a) Redegør for, hvilket atom der reduceres og hvilket atom, der oxideres i reaktion 1.

Vi ved at rene grundstoffer har et oxidationstal på 0. Vi ved også, at oxygen som regel har et oxidationstal på -2, når det er bundet med andre grundstoffer

Derfor har Neodym som Nd (s) og O i O_2 (g) et begge oxidationstal på 0. O i Nd_2O_3 har et oxidationstal på -2.

Oxidationstallet for Neodym i Nd_2O_3 kan derfor beregnes ved at løse ligningen

$$2 \cdot x + 3 \cdot (-2) = 0 \quad (\text{idet summen af oxidationstallene for alle atomer er lig med ladningen})$$

⇕

$$x = 3$$

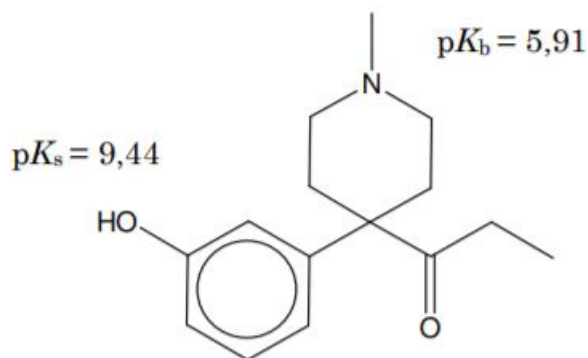
Neodyms oxidationstal går altså fra op 0 til 3, så det oxideres

Oxygens oxidationstal går fra ned 0 til -2, så det reduceres

Tegning:

Ketobemidonmolekylet indeholder en syregruppe og en basegruppe. I vandig opløsning kan ketobemidon således findes på tre forskellige former.

pK_s - og pK_b -værdierne ved 25 °C er anført ud for de grupper, de hører til.



Tegn strukturerne af de tre forskellige former, som ketobemidon kan findes på i vandig opløsning.

Ud over den angivne form 1) er der formen, der dannes ved afgivelse af en hydron fra syregruppen 2) samt formen, der dannes ved optagelse af en hydron til basegruppen

1	2	3
Structure 1: Ketobemidon, the neutral form, consisting of a 3-hydroxyphenyl group, a 1-methylpiperidine ring, and a 2-butanone group.	Structure 2: The form resulting from the loss of a proton from the phenolic hydroxyl group, shown as a phenoxide ion with a negative charge on the oxygen atom.	Structure 3: The form resulting from the addition of a proton to the tertiary amine nitrogen, shown as a protonated piperidine ring with a positive charge on the nitrogen atom.

Undersøgelse

En patient får indsprøjtet 4,0 mg tramadol i blodet pr. kg kropsvægt. Koncentrationen af tramadol i blodet følges i tiden efter indsprøjtningen.

Tabel 4.1

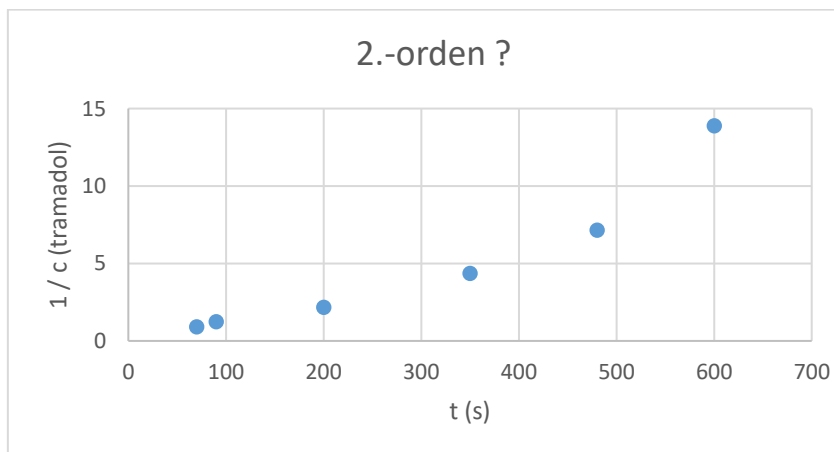
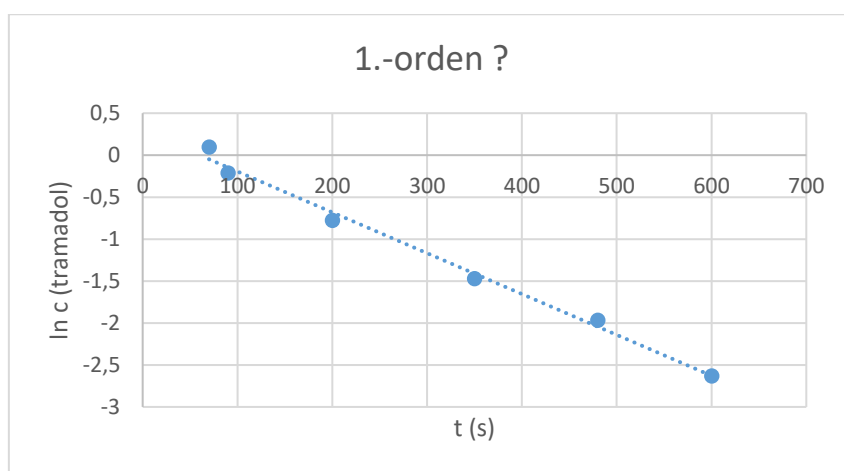
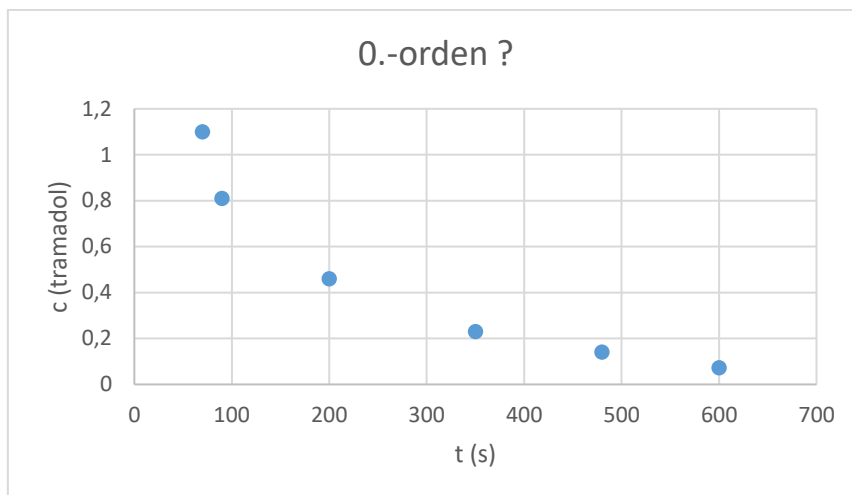
t / min	$c(\text{tramadol}) / (\text{mg/L})$
10	21
30	3,0
50	1,5
70	1,1
90	0,81
200	0,46
350	0,23
480	0,14
600	0,072

I starten falder koncentrationen af tramadol i blodet kraftigt, fordi en del af stoffet optages i kroppens væv.

- c) Undersøg, hvilken reaktionsorden omdannelsen af tramadol i blodet følger, efter at stoffet er optaget i kroppens væv. Anfør funktionsudtrykket for koncentrationen af tramadol i blodet som funktion af tiden, efter at stoffet er optaget i kroppens væv.

For at finde reaktionsordnen laves afbildninger af hhv. c , $\ln c$ og $1/c$ – alle som funktion af t . Det sker ud fra talværdierne, der stammer fra målinger efter 60 sekunder. Man må formode, at optagelsen i kropsvævet er ophørt da. Det sker ud fra tal-værdierne

$t (s)$	$c (M)$	$\ln(c)$	$1/c (M^{-1})$
70	1,1	0,09531	0,909091
90	0,81	-0,21072	1,234568
200	0,46	-0,77653	2,173913
350	0,23	-1,46968	4,347826
480	0,14	-1,96611	7,142857
600	0,072	-2,63109	13,88889



Man ser at punkterne på afbildningen af $\ln$ til koncentrationen mod tiden tilnærmelsesvist ligger på en ret linje.

Det kan derfor konkluderes, at der er tale om en

1.-ordensreaktion

Vis

Nedbrydningen af fexofenadin har været fulgt i 10 raske personer, der hver indtog 120 mg fexofenadin. Omsætningen af fexofenadin følges i blodet i tiden efter indtagelse af stoffet.

Resultaterne er gemt i nedenstående datafil

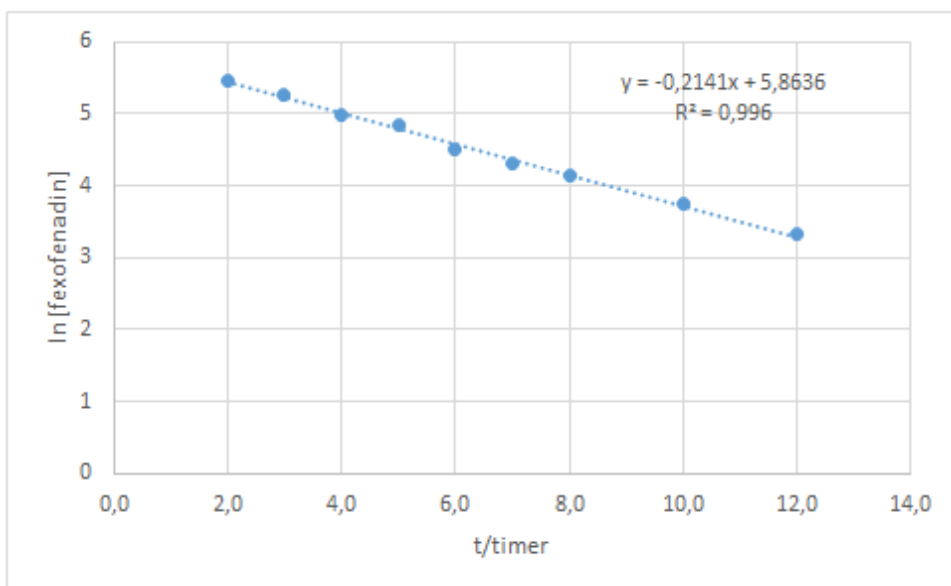
Excel-fil

c) Vis, at reaktionsordenen for omdannelsen af fexofenadin i blodet er af første orden, efter den maksimale koncentration af stoffet i blodet er opnået.

Ved reaktioner af første orden aftager den naturlige logaritme til koncentrationerne lineært med tiden.

Beregnes $\ln$ til koncentrationerne efter, at den maksimale koncentration er opnået, kan følgende tal og grafiske afbildning fås

t/ timer	$\ln$ [fexofenadin]
2,0	5,459585514
3,0	5,272999559
4,0	4,976733742
5,0	4,828313737
6,0	4,49980967
7,0	4,317488114
8,0	4,143134726
10	3,737669618
12	3,33220451

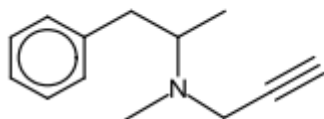


Det ses, at punkterne tilnærmelsesvist lægger sig på en ret linje med $R^2 > 0,99$

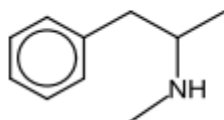
Det er således vist, at reaktionsordnen for omdannelsen er af første orden

Vurdering:

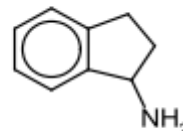
Selegilin er et lægemiddel, som var på markedet tidligere end rasagilin, og det virker på samme måde, men er ikke helt så effektivt. En af bivirkningerne ved at indtage selegilin kan være, at patienten får hallucinationer, fordi stoffet blandt andet nedbrydes til methamfetamin. Rasagilin nedbrydes til 1-indanamin.



selegilin



methamfetamin



1-indanamin

- c) Vurder, om rasagilin, selegilin, methamfetamin og 1-indanamin kan skelnes fra hinanden ud fra karakteristiske absorptionsbånd over 1500 cm^{-1} i stoffernes IR-spektre.
-

Selegilin vil sandsynligvis kunne skelnes fra de andre stoffer, da det er en alkyne.

$C \equiv C$ – stræk vil kunne ses ved $2260\text{--}2100\text{ cm}^{-1}$

Methamfetamin er en sekundær amin. Den vil have

NH-stræk (et bånd) ved $3500\text{--}3300\text{ cm}^{-1}$, om end det er svagt

1-indanamin er en primær amin. For den vil der kunne ses

NH-stræk som to bånd ved hhv 3500 og 3400 cm^{-1}

De angivne talværdier stammer fra Databogen

Konklusionen er, at stofferne godt kan skelnes fra hinanden ud fra deres IR-spektre