

BASISKEMI A

OLE VESTERLUND NIELSEN · VIBEKE AXELSEN

Facit



Praxis

Vibeke Axelsen og Ole Vesterlund Nielsen:

Basiskemi A. Facit, 2. udgave

© forfatterne og Praxis Forlag 2023

Forside: Kit Hansen med illustration af Carsten Valentin

Typografisk tilrettelæggelse: Carsten Valentin og Michael Haase

Sat med ITC Legacy Serif og ITC Legacy Sans

1. ebogsudgave 2023

Filversion 1.03 2024

ISBN 978-87-29-00975-7

Digital kopiering af dette materiale eller dele deraf er tilladt i henhold til bestemmelserne i licensaftalen. Print og analog kopiering af materialet er ikke dækket af licensen og er kun tilladt inden for rammerne af institutionens aftale med Copydan Tekst & Node.

Denne titel indgår i Praxis' fagpakke til kemi, der indeholder adaptive træningsforløb og supplerende temaforløb. Yderligere information samt adgang til download af ekstramateriale findes på forlagets hjemmeside.

Praxis Forlag A/S – et selskab i Egmont

www.praxis.dk

Forord

Denne 2. udgave af *Basiskemi A. Facit* indeholder facitliste til opgaverne i *Basiskemi A, 2. udgave*. Den er tænkt som et praktisk hjælpemiddel for elever og selvstuderende, der ønsker at kontrollere egne resultater.

Resultaterne er præsenteret så kort og præcist som muligt med færrest mulige kommentarer. Kun hvor der er flere forskellige svar i samme opgave, er de enkelte resultater præciseret. Fx er der ikke angivet $n(\text{Na}_2\text{SO}_4) = 0,0300$ mol, hvis det er tilstrækkeligt at angive 0,0300 mol. Til gengæld angives både størrelsesbetegnelse og resultat, når det er nødvendigt, fx $[\text{H}_3\text{O}^+] = 0,055$ M og $[\text{OH}^-] = 1,8 \cdot 10^{-13}$ M. Man kan med andre ord ikke i alle tilfælde forvente at finde alle korrekte betegnelser for de beregnede størrelser.

Ved beregningen af resultaterne i facitlisten er der anvendt de atommasser, der er angivet i periodesystemet, som findes bagest i *Basiskemi A*. Resultaterne er afrundet efter de almindeligt anvendte afrundingsregler.

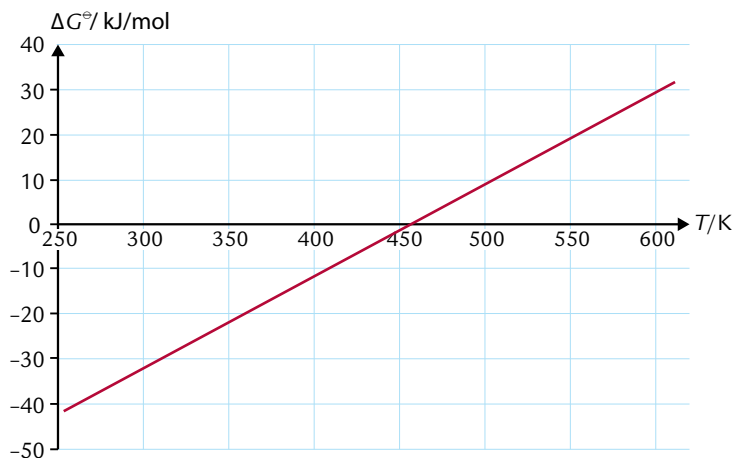
Kommentarer til facitlisten, forslag til ændringer og påvisning af eventuelle fejl vil blive modtaget med taknemmelighed (mail: info@praxis.dk).

*Vibeke Axelsen
Ole Vesterlund Nielsen*

1. a) $\Delta n(\text{gasser}) = 0,52 \text{ mol}$
b) $\Delta V = 13 \text{ L}$
2. a) $\Delta H^\ominus = -369,04 \text{ kJ/mol}$ exoterm
b) $\Delta H^\ominus = -480,68 \text{ kJ/mol}$ exoterm
c) $\Delta H^\ominus = 211,58 \text{ kJ/mol}$ endoterm
d) $\Delta H^\ominus = -65,72 \text{ kJ/mol}$ exoterm
e) $\Delta H^\ominus = -74,8 \text{ kJ/mol}$ exoterm
f) $\Delta H^\ominus = -197,82 \text{ kJ/mol}$ exoterm
g) $\Delta H^\ominus = 25,7 \text{ kJ/mol}$ endoterm
3. a) $\Delta H^\ominus = -55,82 \text{ kJ/mol}$
b) $\Delta H^\ominus = -55,82 \text{ kJ/mol}$
c) Reaktion b) fås ved addition af et vandmolekyle på begge sider af reaktionspilen for reaktion a), og derfor bliver ΔH^\ominus for reaktionerne a) og b) ens.
4. a) $\Delta H^\ominus = -1275,82 \text{ kJ/mol}$
b) $\Delta H^\ominus = -1451,94 \text{ kJ/mol}$
c) $\Delta H^\ominus = 44,0 \text{ kJ/mol}$
d) Differencen mellem ΔH^\ominus for reaktion a) og ΔH^\ominus for reaktion b) er lig $-176,0 \text{ kJ/mol}$, svarende cirka til fire gange ΔH^\ominus for reaktion c).
5. a) $\Delta H^\ominus(298 \text{ K}) = -116,2 \text{ kJ/mol}$
b) $\Delta H^\ominus(298 \text{ K}) = -91,8 \text{ kJ/mol}$
c) Begge reaktionerne i a) henholdsvis b) er exoterme, da $\Delta H^\ominus < 0$.
d) $\Delta H^\ominus(500 \text{ K}) = -116,3 \text{ kJ/mol}$
 $\Delta H^\ominus(500 \text{ K}) = -100,2 \text{ kJ/mol}$
e) Beregningerne viser, at $\Delta H^\ominus(298 \text{ K}) \approx \Delta H^\ominus(500 \text{ K})$ for reaktionen i a), mens der er en mindre forskel for reaktionen i b). Beregningerne viser, at ΔH^\ominus stort set er uafhængig af temperaturen.
6. Den forøgede værdi af S^\ominus for vand i flydende henholdsvis gasform skyldes en øget grad af uorden ved skift fra den ene tilstandsform til den anden.
7. a) $\Delta S^\ominus(298 \text{ K}) = -146,6 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
b) $\Delta S^\ominus(298 \text{ K}) = -198,1 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
c) Entropien falder for begge reaktioner, hvilket stemmer overens med, at antallet af gasmolekyler falder ved reaktionerne.
d) $\Delta S^\ominus(500 \text{ K}) = -151,9 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$ (reaktionen fra a)
 $\Delta S^\ominus(500 \text{ K}) = -219,0 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$ (reaktionen fra b)
e) Beregningerne viser, at ΔS^\ominus stort set er uafhængig af temperaturen.

8. a) $\Delta S^{\ominus} = 43,0 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 b) $\Delta S^{\ominus} = -64,37 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 c) $\Delta S^{\ominus} = 166,06 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 d) I reaktion a) sker der en stigning i uordenen, fordi NaCl opløses. I reaktion b) falder entropien, fordi der sker en fældningsreaktion. I reaktion c) vokser entropien, fordi antallet af gasmolekyler stiger.
9. a) $\Delta S^{\ominus} = 128,6 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 b) $\Delta S^{\ominus} = 333,5 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 c) $\Delta S^{\ominus} = -187,95 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 d) For reaktionerne i både a) og b) er $\Delta S^{\ominus} > 0$, hvilket især skyldes, at uordnen stiger på grund af et voksende antal molekyler på gasform. I reaktion c) er $\Delta S^{\ominus} < 0$; det kan forklares ved, at reaktionen bevirker et fald i antallet af partikler på gasform.
10. a) $\Delta H^{\ominus} = 182,6 \text{ kJ/mol}$
 $\Delta S^{\ominus} = 24,8 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 $\Delta G^{\ominus} = 175,2 \text{ kJ/mol}$
 b) $\Delta H^{\ominus} > 0$, det er en endoterm reaktion.
 $\Delta G^{\ominus} > 0$, reaktionen vil ikke kunne forløbe spontant ved standardbetingelser og 298 K.
 $\Delta S^{\ominus} > 0$, der er en svag stigning i entropi.
 c) $T = 7,36 \cdot 10^3 \text{ K}$
11. a) $\Delta H^{\ominus} = -571,66 \text{ kJ/mol}$
 $\Delta S^{\ominus} = -195,93 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 $\Delta G^{\ominus} = -474,3 \text{ kJ/mol}$
 b) $\Delta H^{\ominus} < 0$, det er en exoterm reaktion.
 $\Delta S^{\ominus} < 0$, reaktionen medfører en formindskelse af systemets uorden.
 $\Delta G^{\ominus} < 0$, reaktionen vil kunne forløbe spontant ved standardbetingelser og 298 K.
 c) $T = 2,92 \cdot 10^3 \text{ K}$
12. a) $\Delta G^{\ominus}(25 \text{ }^{\circ}\text{C}) = -32,8 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$
 b) Ved 25 °C: $\Delta G^{\ominus} < 0$, reaktionen vil kunne forløbe spontant ved standardbetingelser.
 c) $\Delta H^{\ominus} = -91,0 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$
 $\Delta S^{\ominus} = -198,05 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$
 d) $\Delta H^{\ominus} < 0$, det er en exoterm reaktion.
 $\Delta S^{\ominus} < 0$, reaktionen medfører en formindskelse af systemets uorden.

- e) $\Delta G^\ominus(400\text{ }^\circ\text{C}) = 42,3 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$
 f) Ved $400\text{ }^\circ\text{C}$: $\Delta G^\ominus > 0$, reaktionen vil ikke kunne forløbe spontant ved standardbetingelser.
 g) $T = 459\text{ K}$ eller $186\text{ }^\circ\text{C}$
 h)



- i) $\Delta G(400\text{ }^\circ\text{C}) = -4,19 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$. Da $\Delta G(400\text{ }^\circ\text{C}) < 0$, vil reaktionen kunne forløbe spontant ved $400\text{ }^\circ\text{C}$ ved de givne betingelser. Ved standardtilstanden ville reaktionen kun kunne forløbe spontant, hvis temperaturen maksimalt er $186\text{ }^\circ\text{C}$.

13. $K = 6,10\text{ bar}^2$

14. a) $K = 5,62 \cdot 10^5\text{ bar}^{-2}$

b) $\Delta G^\ominus = -65,6\text{ kJ/mol}$

$K = 3,16 \cdot 10^{11}\text{ bar}^{-4}$

- c) Reaktionen i b) er opnået ved at gange koefficienterne i reaktionen fra a) med 2. Når man gør dette, skal ligevægtskonstanten kvadreres.

15. $\Delta G^\ominus = 131,0\text{ kJ/mol}$

$K = 1,07 \cdot 10^{-23}\text{ bar}$

$Y = p(\text{CO}_2)$. Da $Y > K$, vil der vil ske en forskydning mod venstre.

16. En katalysator ændrer ikke på systemets start- og sluttilstand. Derved ændres systemets værdier af ΔH^\ominus , ΔG^\ominus , ΔS^\ominus og ΔG ikke ved anvendelse af en katalysator. Derfor ændres ligevægtskonstanten ikke.

17. a) $\ln K = 19180\text{ K}^{-1} \cdot \frac{1}{T} - 48,714$

b) $\Delta H^\ominus = -159,2 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$. Da $\Delta H^\ominus < 0$, er reaktionen exoterm.

c) $\Delta S^\ominus = -405,0 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$. $\Delta S^\ominus < 0$, entropien falder, fordi antallet af gasmolekyler aftager.

d) $K = \frac{p(\text{Ni}(\text{CO})_4)}{p(\text{CO})^4}$

- e) $K = 7,212 \cdot 10^3 \text{ bar}^{-3}$
 f) $p(\text{CO}) = 9,02 \cdot 10^{-2} \text{ bar}$, og $p(\text{Ni}(\text{CO})_4) = 0,477 \text{ bar}$
 g) $K = 2,846 \cdot 10^{-4} \text{ bar}^{-3}$
 h) $p(\text{CO}) = 1,982 \text{ bar}$, og $p(\text{Ni}(\text{CO})_4) = 0,0044 \text{ bar}$
 i) Forskydningen sker mod venstre. Der dannes 3,63 g nikkel.

18. a) $\Delta H^\ominus = 182,6 \text{ kJ/mol}$

$$\Delta S^\ominus = 24,8 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$K(298 \text{ K}) = 1,95 \cdot 10^{-31}$$

$$K(1500 \text{ K}) = 8,68 \cdot 10^{-6}$$

$$K(2000 \text{ K}) = 3,38 \cdot 10^{-4}$$

- b) K vokser, når temperaturen øges, hvilket svarer til, at mængden af NO vokser.
 c) Ved afkøling nedsættes reaktionshastigheden, og ved en hurtig nedkøling når stort set intet NO omdannet til N_2 og O_2 .
 d) –

19. $\Delta H^\ominus = -748,6 \text{ kJ/mol}$

$$\Delta S^\ominus = -197,7 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$K(600 \text{ }^\circ\text{C}) = 2,89 \cdot 10^{34} \text{ bar}^{-1}$$

Ligevægtskonstanten er meget stor. Derfor ligger ligevægten langt mod højre, dvs. at der sker en meget effektiv omdannelse af udstødningssens indhold af NO.

20. $\Delta H^\ominus = 205,9 \text{ kJ/mol}$

$$\Delta S^\ominus = 214,6 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$$

$$K(250 \text{ }^\circ\text{C}) = 4,45 \cdot 10^{-10} \text{ bar}^2$$

$$K(900 \text{ }^\circ\text{C}) = 1,10 \cdot 10^2 \text{ bar}^2$$

21. a) Der laves en afbildning i et $(t, [A])$ -diagram. Tendenslinjen indtegnes, og forskriften er:

$$[A] = -0,000250 \text{ M/s} \cdot t + 0,100 \text{ M} \quad r^2 = 0,9997$$

Punkterne følger meget tæt den lineære sammenhæng. Hermed er det vist, at reaktionen er af nulte orden.

b) $k = 0,000250 \text{ M/s}$

c) $t = 400 \text{ s}$

d) $T_{1/2} = 140 \text{ s}$

22. Til tiden $T_{1/2}$ er $[A] = 1/2 \cdot [A]_0$. Indsættes dette i funktionsudtrykket for en første ordens reaktion, fås:

$$\ln(1/2 \cdot [A]_0) = -k \cdot T_{1/2} + \ln[A]_0$$

Isolerer $T_{1/2}$ fås:

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

23. a) Foretages en afbildning af måledata i et $(t, [\text{N}_2\text{O}_5])$ -diagram, og udføres en eksponentiel regression på datasættet, fås:

$$[\text{N}_2\text{O}_5] = 0,220 \text{ M} \cdot e^{-0,000618 \text{ s}^{-1} \cdot t} \quad r^2 = 0,9999$$

Foretages en afbildning af måledata i et $(t, \ln[\text{N}_2\text{O}_5])$ -diagram, og udføres en lineær regression på datasættet, fås:

$$\ln[\text{N}_2\text{O}_5] = -0,000618 \text{ s}^{-1} \cdot t - 1,52 \quad r^2 = 0,9999$$

I begge tilfælde ligger målepunkterne meget tæt på regressionslinjen, og det hermed vist, at reaktionen er af første orden.

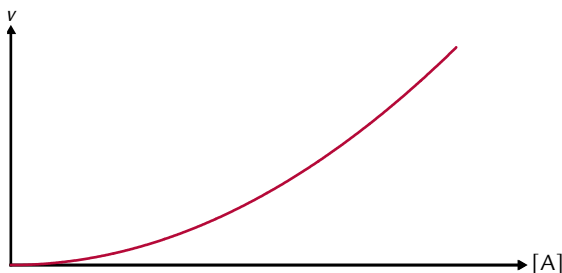
b) $k = 0,000618 \text{ s}^{-1}$ $T_{1/2} = 1,12 \cdot 10^3 \text{ s}$

c) $v = 1,24 \cdot 10^{-4} \text{ M/s}$

d) $t = 6 \cdot 10^3 \text{ s}$

e) $v = 3 \cdot 10^{-6} \text{ M/s}$

24.



25. Til tiden $T_{1/2}$ er $[A] = 1/2 \cdot [A]_0$. Indsættes dette i funktionsudtrykket for en anden ordens reaktion, fås:

$$\frac{1}{1/2 \cdot [A]_0} = k \cdot T_{1/2} + \frac{1}{[A]_0}$$

Isoleres $T_{1/2}$, fås:

$$T_{1/2} = \frac{1}{k \cdot [A]_0}$$

26. a) Foretages en afbildning af måledata i et $(t, 1/[\text{OH}^-])$ -diagram, og udføres en lineær regression på datasættet, fås:

$$\frac{1}{[\text{OH}^-]} = 0,645 \text{ M}^{-1} \cdot \text{min}^{-1} \cdot t + 20,0 \text{ M}^{-1} \quad r^2 = 1,000$$

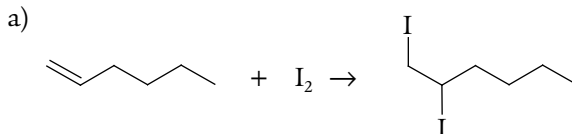
Målepunkterne følger meget tæt regressionslinjen, og det er hermed vist, at reaktionen er af anden orden.

b) $k = 0,645 \text{ M}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$

c) $t = 1,52 \cdot 10^3 \text{ min}$

d) $v = 6,5 \cdot 10^{-7} \text{ M/min}$

27.



- b) Foretages en afbildning af måledata i et $(t, [I_2])$ -diagram, og udføres en lineær regression på datasættet, fås:

$$[I_2] = -1,58 \cdot 10^{-6} \text{ M} \cdot \text{s}^{-1} \cdot t + 0,0172 \text{ M} \quad r^2 = 0,8919$$

Foretages en afbildning af måledata i et $(t, \ln[I_2])$ -diagram, og udføres en lineær regression på datasættet, fås:

$$\ln[I_2] = -0,000142 \text{ s}^{-1} \cdot t - 4,03 \quad r^2 = 0,9715$$

Foretages en afbildning af måledata i et $(t, \frac{1}{[I_2]})$ -diagram, og udføres en lineær regression på datasættet, fås:

$$\frac{1}{[I_2]} = 0,0139 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot t + 50,3 \text{ M}^{-1} \quad r^2 = 0,9999$$

Undersøgelsen viser, at der må være tale om en anden ordens reaktion med hensyn til diiod.

c) $\frac{1}{[I_2]} = 0,0139 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot t + 50,3 \text{ M}^{-1}$

d) $v = 0,0139 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot [I_2]^2$

e) $[I_2] = 0,020 \text{ M}$: $v = 5,6 \cdot 10^{-6} \text{ M/s}$

$[I_2] = 0,010 \text{ M}$: $v = 1,4 \cdot 10^{-6} \text{ M/s}$

Ved en halvering af den aktuelle stofmængdekonzentration af diiod bliver hastigheden en fjerdedel, hvilket også kan ses af, at $[I_2]$ opløftet i 2. potens indgår i hastighedsudtrykket.

f) $[I_2] = 5,3 \cdot 10^{-3} \text{ M}$

g) $t = 1,1 \cdot 10^4 \text{ s}$

- 28.** a) Foretages en afbildning af måledata i et $(t, [\text{Kry}])$ -diagram, og udføres en lineær regression på datasættet, fås:

$$[\text{Kry}] = -3,13 \cdot 10^{-7} \text{ M} \cdot \text{s}^{-1} \cdot t + 2,41 \cdot 10^{-5} \text{ M} \quad r^2 = 0,9945$$

Foretages en afbildning af måledata i et $(t, \ln[\text{Kry}])$ -diagram, og udføres der lineær regression på datasættet, fås:

$$\ln[\text{Kry}] = -0,0209 \text{ s}^{-1} \cdot t - 10,6 \quad r^2 = 0,9946$$

Foretages en afbildning af måledata i et $(t, \frac{1}{[\text{Kry}]})$ -diagram, og udføres en lineær regression på datasættet, fås:

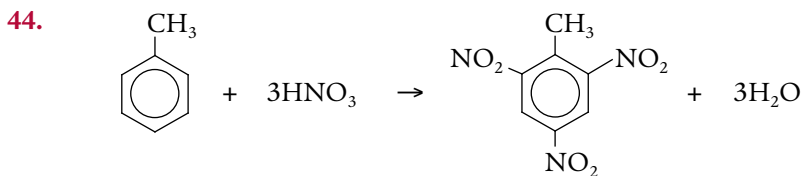
$$\frac{1}{[\text{Kry}]} = 1,47 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot t + 3,15 \cdot 10^3 \text{ M}^{-1} \quad r^2 = 0,9666$$

Afbildningen viser, at reaktionen ikke følger en anden ordens reaktion, da målepunkterne ikke ligger særlig tæt på regressionslinjen. Derimod ligger målepunkterne rimelig tæt på regressionslinjerne for både en nulte og en første ordens reaktion, og forklaringsgraden r^2 for de to afbildninger er næstens ens. Det er derfor ikke muligt at afgøre, om der er tale om en nulte eller en første ordens reaktion.

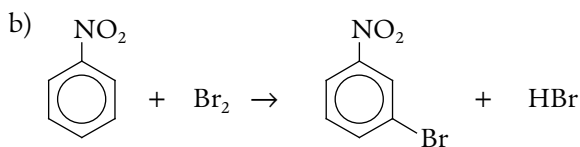
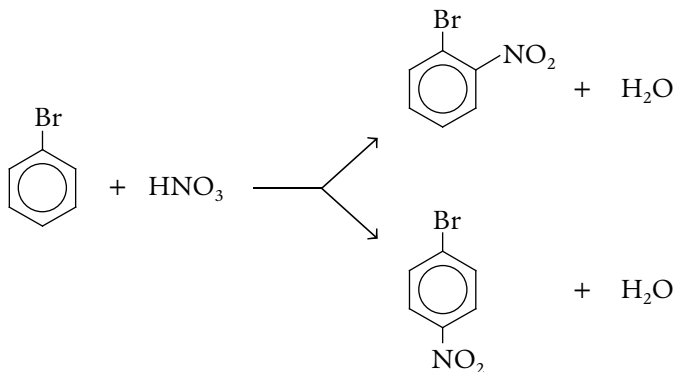
- b) Hvis måleserien får lov at forløbe i længere tid, kan man forvente, at det er muligt at afgøre, om reaktionen er af nulte eller første orden.

29. [B] aftager med 0,0100 M, eller 1,00 %.
30. $v = k \cdot [A] \cdot [B]^2$ $k = 9,7 \cdot 10^{-2} \text{ M}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$
31. a) $v = k \cdot [\text{H}_2\text{O}_2] \cdot [\text{I}^-]$. Begge eksponenter er 1.
b) $k = 1,15 \cdot 10^{-2} \text{ M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
32. Foretages en afbildning af måledata i et $(\frac{1}{T}, \ln k)$ -diagram, og udføres en lineær regression på datasættet, fås:
$$\ln k = -1,09 \cdot 10^4 \text{ K} \cdot \frac{1}{T} + 27,8 \quad r^2 = 0,9998$$
Målepunkterne ligger meget tæt på regressionslinjen; det er hermed vist, at reaktionen følger Arrhenius-ligningen.
 $E_a = 90,5 \text{ kJ/mol}$
33. –
34. $E_a = 51 \text{ kJ/mol}$
35. a) $E_a = 114 \text{ kJ/mol}$
b) $k = 8,02 \frac{1}{\text{M} \cdot \text{s}}$
36. $5,1 \cdot 10^8$ gange
37. $[\text{N}_2\text{O}_2] = \frac{k_1}{k_2} \cdot [\text{NO}]^2$
$$v = k_3 \cdot [\text{N}_2\text{O}_2] \cdot [\text{O}_2] = \frac{k_1 \cdot k_3}{k_2} \cdot [\text{NO}]^2 \cdot [\text{O}_2]$$
38. a) CH_4 – ikke et nucleofilt reagens (mangler et ledigt elektronpar)
b) S^{2-} – et nucleofilt reagens (har ledigt elektronpar)
Eksempel på reaktion: $\text{CH}_3\text{I} + \text{S}^{2-} \rightarrow \text{CH}_3\text{S}^- + \text{I}^-$
c) PH_3 – et nucleofilt reagens (har ledigt elektronpar)
Eksempel på reaktion: $\text{CH}_3\text{I} + \text{PH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{PH}_3^+ + \text{I}^-$
d) Na – ikke et nucleofilt reagens (mangler ledigt elektronpar)
39. I sur opløsning sker reaktionen:
$$\text{NH}_3(\text{aq}) + \text{H}_3\text{O}^+(\text{aq}) \rightarrow \text{NH}_4^+(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l})$$
 NH_4^+ har ikke noget ledigt elektronpar og kan derfor ikke virke som et nucleofilt reagens.
40. a) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{I} + \text{OH}^- \rightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH} + \text{I}^-$
b) Det er en $\text{S}_{\text{N}}2$ -reaktion.
41. Skal forventes at reagere efter $\text{S}_{\text{N}}2$ -mekanismen, men der er dårligt plads til et angreb »bag på« carbonatomet.
42. a) $\text{C}_6\text{H}_{13}\text{-CHBr-CH}_3 + \text{OH}^- \rightarrow \text{C}_6\text{H}_{13}\text{-CHOH-CH}_3 + \text{Br}^-$
b) $\text{S}_{\text{N}}2$ giver et optisk aktivt produkt.
c) $\text{S}_{\text{N}}1$ skulle give et optisk inaktivt produkt. $\text{S}_{\text{N}}1$ -produkter er dog i praksis ofte noget optisk aktive, idet der er en tendens til, at det nucleofile reagens primært angriber modsat den side, hvor den udgående gruppe sad. En helt fri carbokation når åbenbart ikke altid at blive dannet, inden det nucleofile reagens angriber.

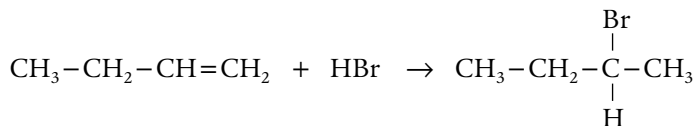
43. -



45. a)



46. I overensstemmelse med Markovnikovs regel vil der ved reaktionen hovedsageligt dannes 2-brombutan:

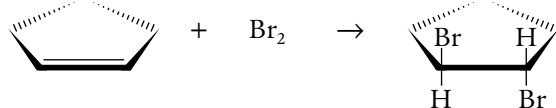


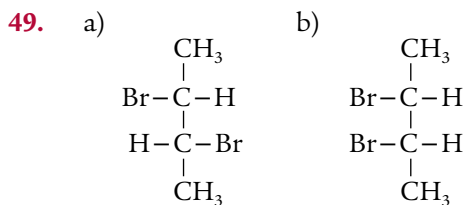
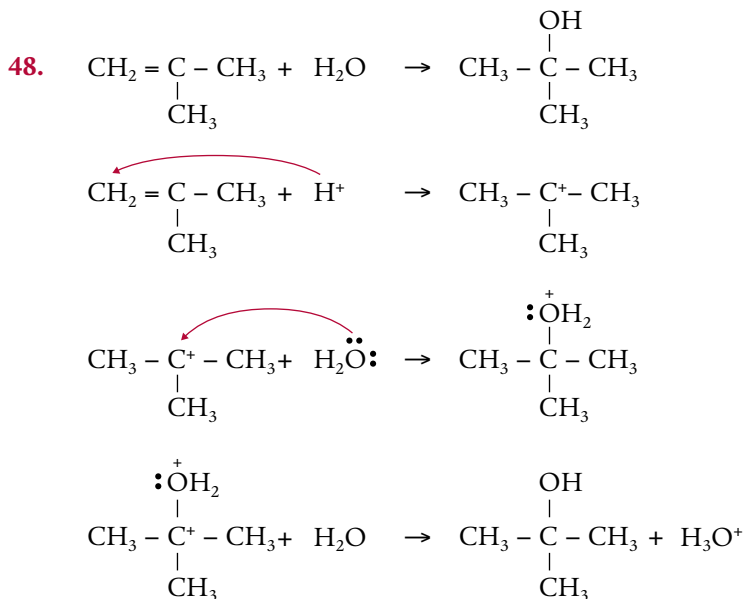
Carbonatom nr. 2 er asymmetrisk, og (*R*)- henholdsvis (*S*)-formerne dannes i lige store mængder.

47. a)



b)





c) De er forskellige.

50. $\lambda = 400 \text{ nm}; E_{\text{foton}} = 4,97 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

$\lambda = 750 \text{ nm}; E_{\text{foton}} = 2,65 \cdot 10^{-19} \text{ J}$

51. $\lambda = 486 \text{ nm}$

52. Nr. 20 Ca [Ar] $4s^2$

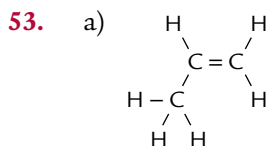
Nr. 28 Ni [Ar] $3d^8 4s^2$

Nr. 29 Cu Opfyldningsrække giver: [Ar] $3d^9 4s^2$

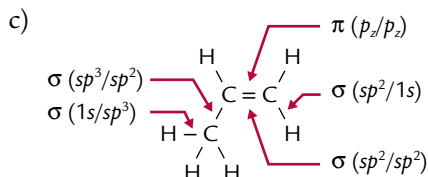
Den faktiske elektronkonfiguration er: [Ar] $3d^{10} 4s^1$

Nr. 35 Br [Ar] $3d^{10} 4s^2 4p^5$

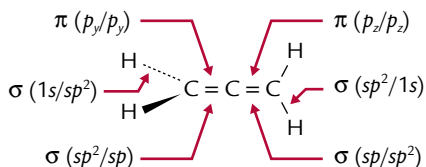
Nr. 62 Sm [Xe] $4f^6 6s^2$



b) Fra venstre: sp^3, sp^2, sp^2



54. a) Fra venstre er C-atomerne hybridiseret: sp^2 , sp , sp^2



- b) H–C–H ligger i samme plan, men de to H–C–H-grupper er placeret vinkelret på hinanden.

55. C-atomet er sp -hybridiseret, mens de to O-atomer er sp^2 -hybridiserede. Den ene sp^2 -orbital bruges til bindingsdannelsen med C-atomet, mens de to øvrige rummer O-atomets to ledige elektronpar.

56. a) $\frac{1}{\lambda} = 400 \text{ cm}^{-1}$: $\lambda = 2,50 \cdot 10^4 \text{ nm}$
 $\frac{1}{\lambda} = 4000 \text{ cm}^{-1}$: $\lambda = 2,50 \cdot 10^3 \text{ nm}$
 b) $\frac{1}{\lambda} = 400 \text{ cm}^{-1}$: $E_{\text{foton}} = 7,96 \cdot 10^{-21} \text{ J}$
 $\frac{1}{\lambda} = 4000 \text{ cm}^{-1}$: $E_{\text{foton}} = 7,96 \cdot 10^{-20} \text{ J}$

57. a)
$$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3-\text{CH}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C} \end{array}$$

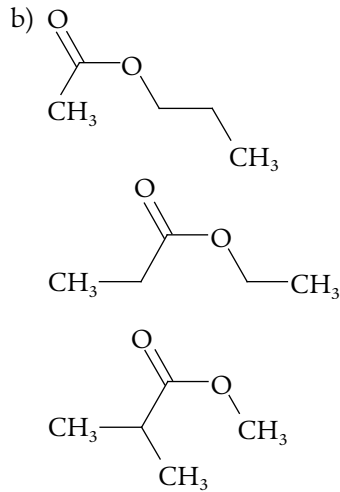
- b) C–H: Absorptionsbånd i området 2500 cm^{-1} til 4000 cm^{-1}
 C \equiv C: Absorptionsbånd i området 2000 cm^{-1} til 2500 cm^{-1}
 C–C: Absorptionsbånd i fingeraftryksområdet

58. Båndene mellem 2500 cm^{-1} og 4000 cm^{-1} tyder på bindingstyper som fx C–H, N–H og/eller O–H. Der er ingen dobbeltbindinger i molekylet.

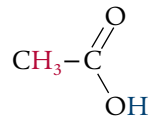
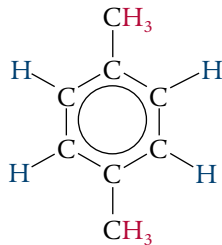
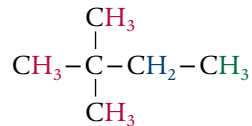
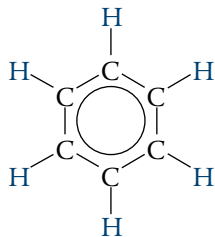
59. Båndet ved 3000 cm^{-1} til 3100 cm^{-1} : sp^2
 Båndene ved 2800 cm^{-1} til 3000 cm^{-1} : sp^3
 Båndet ved 1650 cm^{-1} : sp^2

60. a)
- | Nr. | $\frac{1}{\lambda} / \text{cm}^{-1}$
(aflæst) | Intensitet | Bindingstilordning | Kommentarer | $\frac{1}{\lambda} / \text{cm}^{-1}$
(tabelværdi) |
|-----|--|------------|--------------------------|-------------|--|
| 1 | 2800-3000 | Medium | C–H-strækning (sp^3) | Alkan/alkyl | 2800-3000 |
| 2 | 1750 | Stærk | C=O-strækning | Ester | 1745 |

Båndet ved ca. 1750 cm^{-1} kan ikke skyldes en aldehyd, da der mangler C–H absorptionsbånd ved 2720 cm^{-1} henholdsvis 2820 cm^{-1} .



61. a)



b) Markeret med farver på strukturtegningerne i a).

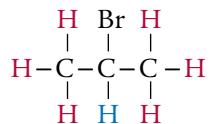
c) Benzen: 1 signal

2,2-dimethylbutan: 3 signaler

1,4-dimethylbenzen: 2 signaler

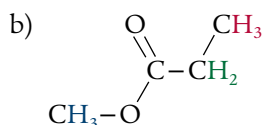
Ethansyre: 2 signaler

62. a)



Ækvivalente ^1H -kerner er angivet med samme farve.

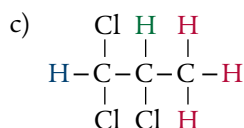
De »røde« ^1H -kerner er mest skærmede.



Ækvivalente ^1H -kerner er angivet med samme farve.

De »blå« ^1H -kerner er mindst skærmede.

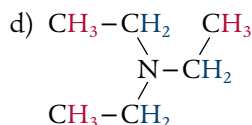
De »røde« ^1H -kerner er mest skærmede.



Ækvivalente ^1H -kerner er angivet med samme farve.

Den »blå« ^1H -kerne er mindst skærmet.

De »røde« ^1H -kerner er mest skærmede.



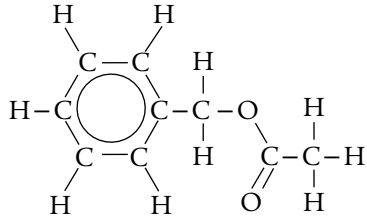
Ækvivalente ^1H -kerner er angivet med samme farve.

De »blå« ^1H -kerner er mindst skærmede.

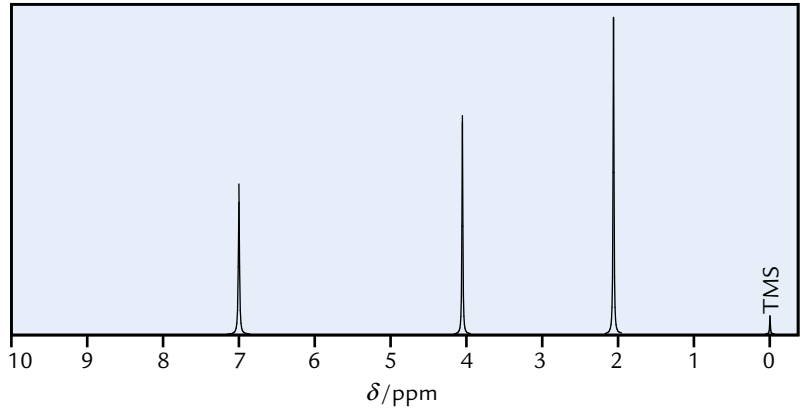
De »røde« ^1H -kerner er mest skærmede.

63. a) Der er to forskellige grupper af ækvivalente ^1H -kerner: de ni »røde« og de tre »blå«.
- b) De ni »røde« ^1H -kerner er relativt godt skærmede, da de er placeret lidt væk fra de elektronegative O-atomer. Signalet vil ligge ved et lavt kemisk skift.
De tre »blå« ^1H -kerner er mindre skærmede, da de har et elektronegativt O-atom som nabo. Signalet vil ligge ved et højere kemisk skift end signalet for de »røde« ^1H -kerner.
- c) De »blå« ^1H -kerner har i begge tilfælde samme kemiske omgivelser i form af en estergruppe: $\text{CH}_3\text{-O-CO-}$.
- d) De ni »røde« ^1H -kerner i methyl-2,2-dimethylpropanoat er placeret fire bindinger væk fra de elektronegative O-atomer, mens de »røde« ^1H -kerner i methylethanoat kun er placeret tre bindinger væk fra et elektronegativt O-atom. De tre »røde« ^1H -kerner i methylethanoat er derfor mindre skærmede end de ni »røde« ^1H -kerner i methyl-2,2-dimethylpropanoat, som derfor ligger ved et lavere kemisk skift.

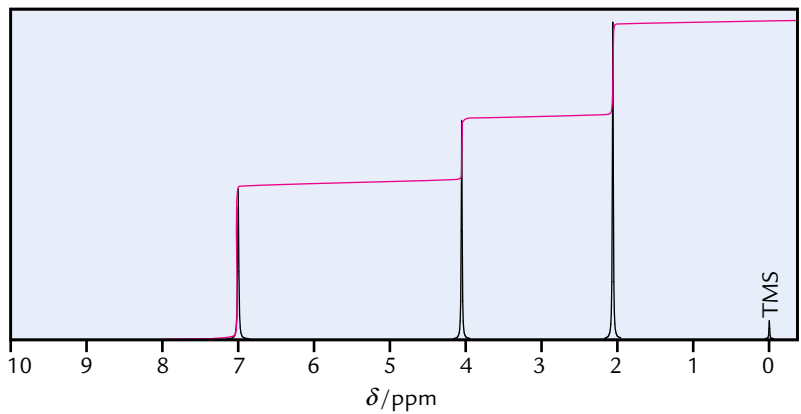
64.



$\delta \approx 7$ ppm, $\delta \approx 4,1$ ppm og $\delta \approx 2,1$ ppm.

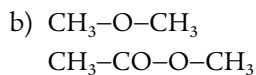
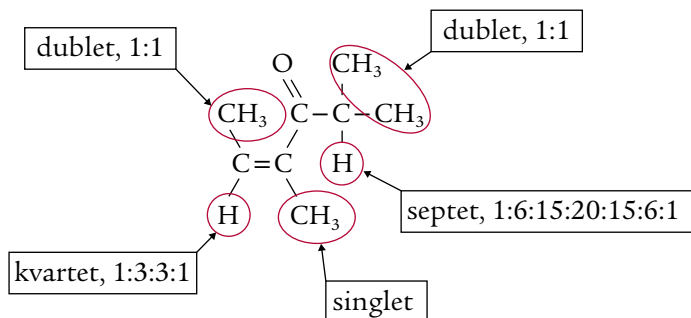


65. Integraltrappetrinnene skal have et forhold i højderne på (læst fra venstre) 5:2:3.



66. a) $\uparrow\uparrow\uparrow$ $\uparrow\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow\uparrow$ $\downarrow\uparrow\uparrow$ $\uparrow\downarrow\downarrow$ $\downarrow\uparrow\downarrow$ $\downarrow\downarrow\uparrow$ $\downarrow\downarrow\downarrow$
 b) Fire linjer med intensitetsforholdet 1:3:3:1.
 c) Ja.

67. a) Der vil være 5 signaler.

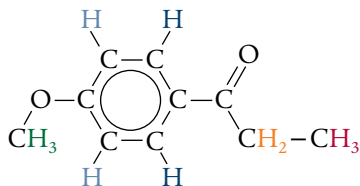


68. a) $\text{DBE} = 0$
 b) $\text{DBE} = 2$
 c) $\text{DBE} = 2$
 d) $\text{DBE} = 5$
 e) $\text{DBE} = 1$
 f) $\text{DBE} = 2$

69.

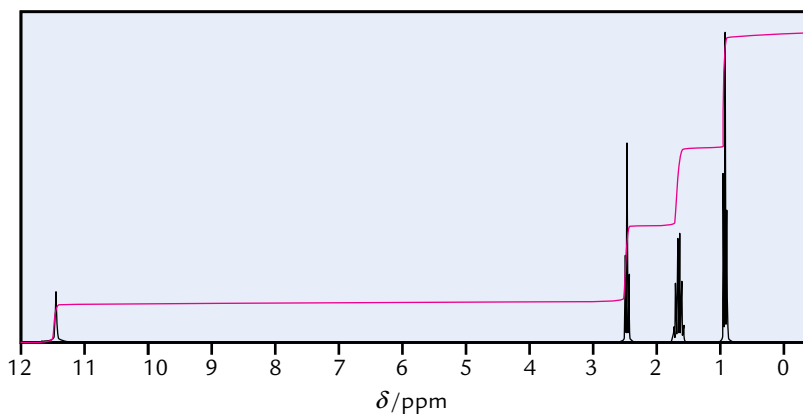
Signal	Kemisk skift (af læst) δ/ppm	Integral/areal (relativt antal) ækvivalente ^1H -kerner	Op-splitning	Antal nabo- ^1H 'er	Tilordning	Kemisk skift (tabelværdi) δ/ppm
1	1,2	3	triplet	2	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO-}$	1,1
2	2,9	2	kvartet	3	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CO-Ar}$	3,0
3	3,8	3	singlet	0	$\text{CH}_3\text{-O-Ar}$	3,8
4	6,9	2	dublet	1	2 Ar-H	6,5-8
5	7,9	2	dublet	1	2 Ar-H	6,5-8

$$\text{DBE} = 5$$

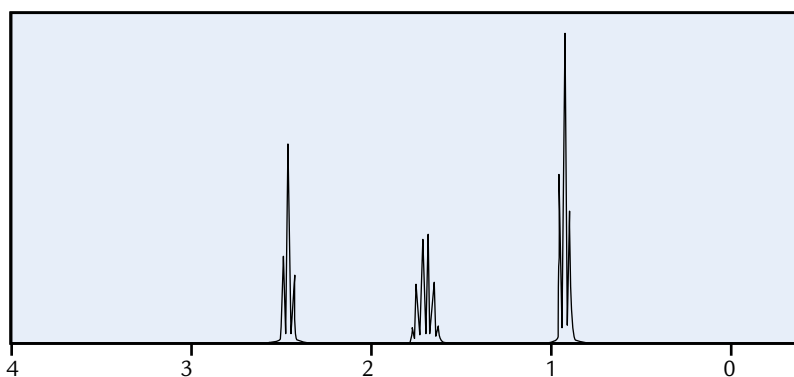




$\delta \approx 0,9 \text{ ppm}$, $\delta \approx 1,7 \text{ ppm}$, $\delta \approx 2,4 \text{ ppm}$ og $\delta \approx 11,5 \text{ ppm}$



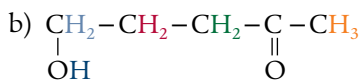
Forstørrelse:



71.

Signal	Kemisk skift (aflest) δ/ppm	Integral/areal (relativt antal ækvivalente ^1H -kerner)	Op-splitting	Antal nabo- ^1H 'er	Tilordning	Kemisk skift (tabelværdi) δ/ppm
1	1,7	2	Pentet	4	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{C}$	1,6
2	2,1	3	Singlet	0	$\text{CH}_3-\text{CO}-\text{C}-$	2,2
3	2,7	2	Triplet	2	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CO}-\text{C}$	2,4
4	3,6	2	Triplet	2	$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$	3,5
5	4,1	1	Singlet, bred	0	$-\text{OH}$	0,5-5

$$\text{DBE} = 1$$



72. a)

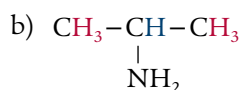
<p>1-brompropan</p> $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2$ <p style="text-align: center;"> Br</p> <p>Tre grupper af ækvivalente ^1H-kerner</p>	<p>2-brompropan</p> $\text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3$ <p style="text-align: center;"> Br</p> <p>To grupper af ækvivalente ^1H-kerner</p>
<p>Fremstillet amin ud fra 1-brompropan</p> $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2$ <p style="text-align: center;"> NH₂</p> <p>Fire grupper af ækvivalente ^1H-kerner Fire signaler i ^1H-spektrum</p>	<p>Fremstillet amin ud fra 2-brompropan</p> $\text{CH}_3-\text{CH}-\text{CH}_3$ <p style="text-align: center;"> NH₂</p> <p>Tre grupper af ækvivalente ^1H-kerner Tre signaler i ^1H-spektrum</p>

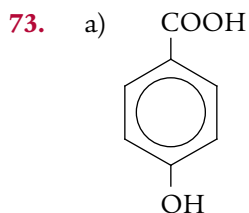
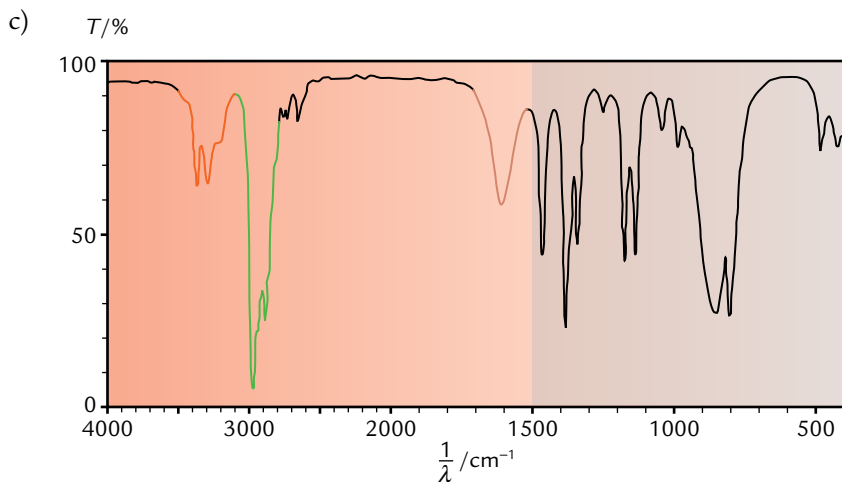
I ^1H -NMR-spektret er der tre signaler (1,0 ppm, 1,1 ppm og 3,0 ppm).
Det vil sige, at det dannede produkt må være propan-2-amin.

Tilordning af ^1H -spektret:

Signal	Kemisk skift (aflæst) δ/ppm	Integral/areal (relativt antal ækvivalente ^1H -kerner)	Opsplittning	Antal nabo- ^1H 'er	Tilordning	Kemisk skift (tabelværdi) δ/ppm
1	1,1	6	Dublet	1	2 CH ₃ - som: CH ₃ -CH-N	1,1
2	1,2	2	Singlet, bred	0	-NH ₂	1-5
3	3,1	1	Septet	6	CH ₃ -CH-N- CH ₃	2,8

Udgangsstoffet var således 2-brompropan.





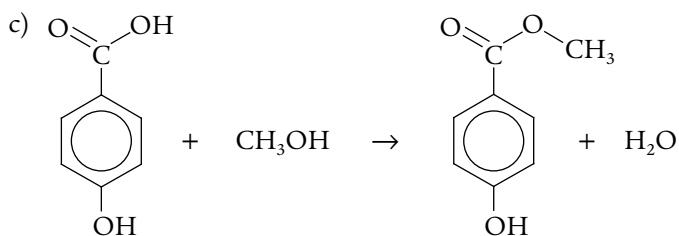
b) En tilordning af absorptionsbånd i IR-spektret for 4-hydroxybenzoesyre:

Nr.	$\frac{1}{\lambda} / \text{cm}^{-1}$ (af læst)	Intensitet	Bindings- tilordning	Kommentarer	$\frac{1}{\lambda} / \text{cm}^{-1}$ (tabelværdi)
1	2500-3500	Medium	O-H-strækning	Carboxylsyre/ meget bredt	2500-3500
2	3350	Medium	O-H-strækning	Phenol	3100-3500
3	3000-3100	Medium/ svagt	C-H (C: sp^2) strækning	Aromatisk ring	3010-3100
4	2800-3000	Medium	C-H (C: sp^3) strækning	Alkyl/flere bånd	2810-2960
5	1660	Stærkt	C=O strækning (carboxylsyre)	Carboxylsyre	ca. 1695
6	1600	Medium	C=C-strækning (C: sp^2)	Aromatisk ring	1600-1700

En tilordning af absorptionsbånd i IR-spektret for methylparaben:

Nr.	$\frac{1}{\lambda} / \text{cm}^{-1}$ (åflæst)	Intensitet	Bindings- tilordning	Kommentarer	$\frac{1}{\lambda} / \text{cm}^{-1}$ (tabelværdi)
1	3300	Stærkt	O–H- strækning	Phenol	3100-3500
2	3000-3100	Svagt	C–H-strækning (C: sp^2)	Aromatisk ring	3010-3100
3	2900	Svagt	C–H-strækning (C: sp^3)	Alkyl/flere bånd	2810-2960
4	1680	Stærkt	C=O- strækning	Ester	ca. 1745
5	1600	Medium/to bånd	C=C-strækning (C: sp^2)	Aromatisk ring/to bånd	1600-1700

Da man ikke kan se et OH-bånd fra syregruppen i spektret fra methylparaben, betyder det, at reaktionen er sket ved syregruppen, og at der er dannet en ester. Dette stemmer overens med, at absorptionsbåndet for C=O i en ester ligger ved et lidt højere bølgetal end absorptionsbåndet for C=O i en syregruppe. Begge absorptionsbånd for C=O ligger ved lidt lavere bølgetal end tabel 24 side 147 angiver, hvilket skyldes konjugation med den aromatiske ring.



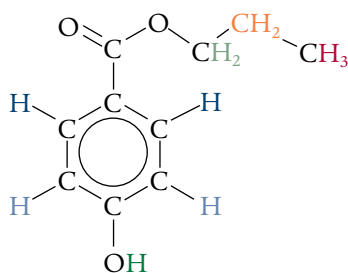
Karakteristiske grupper i methylparaben: estergruppe, hydroxy-
gruppe.

Methylparaben er både en ester og en phenol.

Systematisk navn for methylparaben: methyl-4-hydroxybenzoat.

d)

Signal	Kemisk skift (aflest) δ /ppm	Integral/areal (relativt antal ækvivalente ^1H -kerner)	Opsplitning	Antal nabo- ^1H 'er	Tilordning	Kemisk skift (tabel) δ /ppm
1	1,0	3	Triplet	2	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}$	0,9
2	1,8	2	Sekstet	5	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ O-CO-	1,6
3	4,3	2	Triplet	2	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$ O-CO-	4,4
4	6,9	2	Dublet	1	2 Ar-H	6,5-8
5	7,3	1	Singlet, bred	0	Ar-OH	4,5-10
6	8,0	2	Dublet	1	2 Ar-H	6,5-8



Parabenen må være propylparaben.

74. En tilordning af absorptionsbånd i IR-spektrret for bisphenol-A:

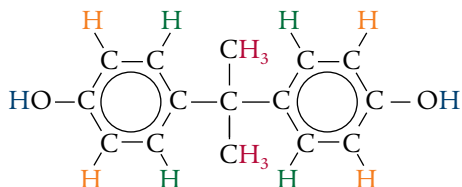
Nr.	$\frac{1}{\lambda} / \text{cm}^{-1}$ (aflest)	Intensitet	Bindings-tilordning	Kommentarer	$\frac{1}{\lambda} / \text{cm}^{-1}$ (tabelværdi)
1	3350	Stærk	O-H strækning	phenol	3100-3500
2	3000-3100	Svagt	C-H-strækning (C: sp^2)	Aromatisk ring	3010-3100
3	2900	Medium	C-H-strækning (C: sp^3)	Alkyl/flere bånd	2810-2960
4	1600	Medium	C=C strækning (C: sp^2)	Aromatisk ring/flere bånd	ca. 1600
5	1500	Stærk	C=C-strækning (C: sp^2)	Aromatisk ring	1500

IR-spektrret viser, at bisphenol A indeholder bindingstyperne OH, CH (sp^2), CH (sp^3), C=C (aromat) og ikke har C=O-bindinger.

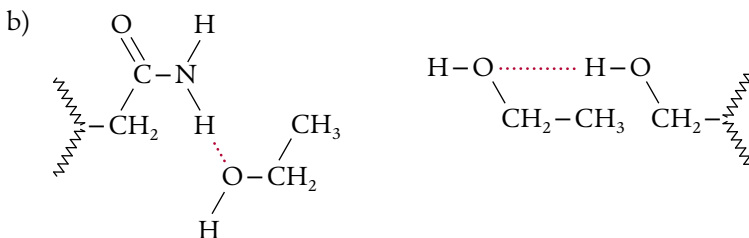
Signal	Kemisk skift (aflæst) δ/ppm	Integral/areal (relativt antal ækvivalente ^1H -kerner)	Opsplittning	Antal nabo- ^1H 'er	Tilordning	Kemisk skift (tabelværdi) δ/ppm
1	1,5	3 \rightarrow 6	Singlet	0	2 $\text{CH}_3\text{-C}$	0,9*
2	6,6	2 \rightarrow 4	Dublet	1	4 Ar-H	6,5-8
3	7,0	2 \rightarrow 4	Dublet	1	4 Ar-H	6,5-8
4	9,2	1 \rightarrow 2	Singlet, bred	0	2 OH (phenol)	4,5-10

* Det målte kemiske skift for ^1H -kernerne i signal 1 er lidt højere end tabelværdien og skyldes en effekt fra de aromatiske ringe.

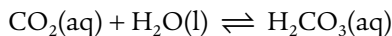
$\text{DBE} = 8$



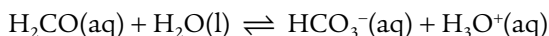
75. a) L-cystein er en *R*-form.
 b) L-phenylalanin er en *S*-form.
 c) L-serin: Sidegruppen er $-\text{CH}_2\text{OH}$, som er polær på grund af den stærkt polære $-\text{OH}$ -gruppe.
 L-leucin: Sidegruppen $-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ er upolær, da den kun indeholder upolære $-\text{CH}$ -grupper.
76. a) Når pH sænkes, kan $-\text{COO}^-$ -gruppen optage en hydron:
 $-\text{COO}^- + \text{H}^+ \rightarrow -\text{COOH}$
 $-\text{COOH}$ kan ikke deltage i dannelse af ionbindinger til den positive ammoniumgruppe, hvilket ændrer de intramolekulære vekselvirkninger i proteinet. Derved forandres også den tertiære struktur.



77. Når CO_2 udåndes på gasform, vil $[\text{CO}_2]$ i blodet bliver mindre på grund af følgende ligevægt: $\text{CO}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CO}_2(\text{aq})$. Denne ligevægt vil forskydes mod venstre ved udånding af $\text{CO}_2(\text{g})$. Dette betyder, at reaktionen:



forskydes mod venstre, hvilket formindsker $[\text{H}_2\text{CO}_3]$. Herved forskydes reaktionen:



også mod venstre.

78. Mikaelis-konstanten $K_M = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1} = \frac{[\text{E}] \cdot [\text{S}]}{[\text{ES}]}$

Da enheden for aktuel stofmængdekonzentration er M, ses det af brøken til højre, at enheden for K_M er M.

Eller:

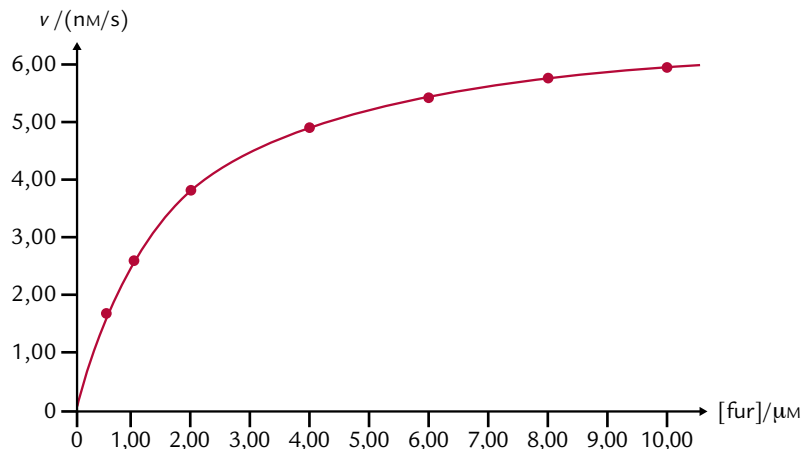
k_1 har enheden $\text{M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, k_{-1} og k_2 har enheden s^{-1}

$$K_M = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1}$$

$$\frac{\text{s}^{-1} + \text{s}^{-1}}{\text{M}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}} = \text{M}$$

Det vil sige, at K_M får enheden M.

79. a) Måleresultaterne afbildes i et $([\text{fur}], v)$ -diagram:



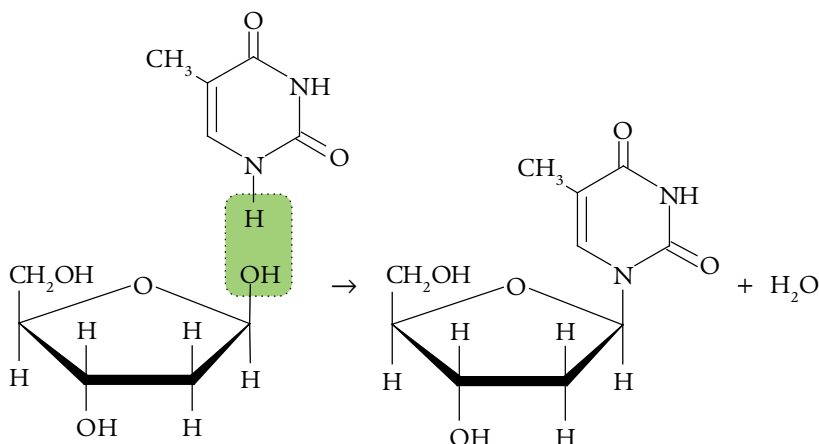
Der laves regression på måleresultaterne:

$$v = 6,57 \text{ nm/s} \cdot \frac{[\text{fur}]}{[\text{fur}] + 1,67 \cdot 10^3 \text{ nm}} \quad r^2 = 0,9997$$

Afbildningen viser, at de eksperimentelle data og Michaelis-Menten-modellen er i god overensstemmelse med hinanden.

- b) $v_{\max} = 6,57 \text{ nM/s} = 6,57 \cdot 10^{-9} \text{ M/s}$
 $K_M = 1,67 \cdot 10^3 \text{ nM} = 1,67 \cdot 10^{-6} \text{ M}$
 c) $[\text{fumarase}]_T = 5,15 \cdot 10^{-3} \text{ nM} = 5,15 \cdot 10^{-12} \text{ M}$
 d) $k_2 = 1,28 \cdot 10^3 \text{ s}^{-1}$

80. a)



b) En kondensationsreaktion.

81. a) DNA-strengen:



Basesekvensen for mRNA-strengen:



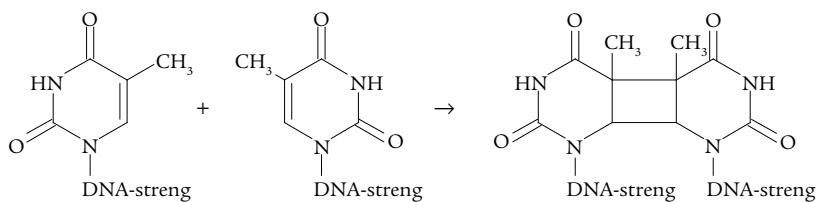
b) Proteinsyntesen sker fra 5'-enden af mRNA, og sekvensen i punkt a) skal læses fra højre mod venstre.

Hvis UAA (læst fra højre) antages at være første led i den genetiske kode, begyndes der med stopkoden; derfor kan der ikke høre en aminosyresekvens til koden.

82. $5' \cdots \text{AUGCCUAGUGAUUGGAUU} \cdots 3'$

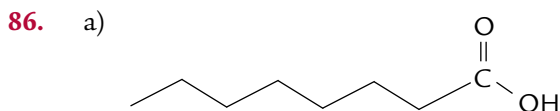
AUG er startkoden: Met-Pro-Ser-Asp-Trp-Ile

83. a)



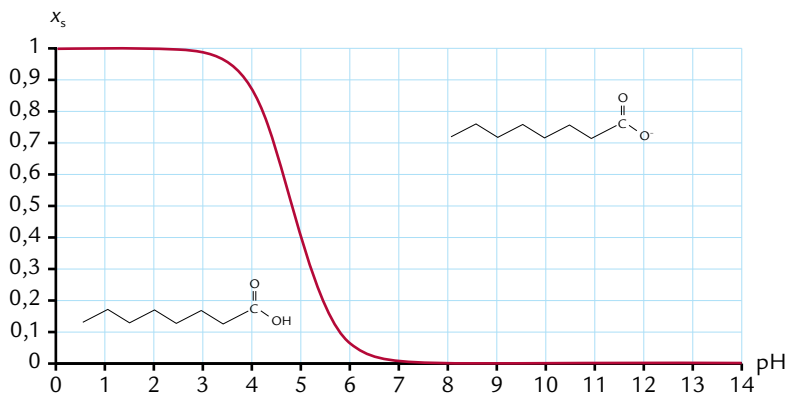
b) Når to thyminenheder er blevet adderet til hinanden, vil det bevirke en deformation af DNA-strengen. Desuden vil DNA-replikationen blive forstyrret.

84. a) Oxidationstallet for N i $-\text{NH}_2$ -gruppen er $-III$ og ændres til 0 (i N_2):
3 op (oxidation af dette N).
Oxidationstallet for N i HNO_2 er $+III$ og ændres til 0 (i N_2):
3 ned (reduktion af dette N).
Det er en redoxreaktion, hvilket kan ses af, at der sker ændringer af
oxidationstallene.
- b) Ved oxidationen får produktet andre muligheder for at danne hydro-
genbindinger end den oprindelige base, hvilket ødelægger mulighe-
derne for korrekt baseparring.
85. a) $c(\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_3) = 1,6432 \cdot 10^{-2} \text{ M} \approx 1,6 \cdot 10^{-2} \text{ M}$
b) $P = 91,2$
c) $c(\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_3(\text{aq})) = 1,8 \cdot 10^{-4} \text{ M}$
 $c(\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_3(\text{octan-1-ol})) = 1,6254 \cdot 10^{-2} \text{ M} \approx 1,6 \cdot 10^{-2} \text{ M}$
d) 1,1 %



Der er 7 carbonatomer med hydrofobe grupper, som mere end
ophæver virkningen af den hydrofile syregruppe. Derfor er octal-1-ol i
overvejende grad upolær.

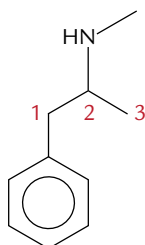
b) $\text{p}K_s = 4,90$



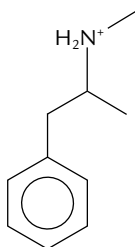
- c) Ved lave pH-værdier under ca. $\text{pH} = 2$ optræder octansyre i vandig
opløsning som et neutralt ladet molekyle, der i overvejende grad er
upolært og derfor forventes at være meget opløselig i det upolære
octan-1-ol. Dette er i overensstemmelse med, at ved lave pH-værdier
er $\log D \approx 2,9$. Det vil sige, at $D \approx 790$, hvilket betyder, at octansyren
ved lave pH-værdier hovedsageligt vil være i den upolære octan-1-ol-
fase.

Hvis pH derimod er noget over syrens pK_s -værdi, vil octansyren stort set være helt omdannet til den korresponderende base, octanoat. Octanoat er en negativ ion. Det giver den en stærk polær karakter, der gør den letopløselig i et polært opløsningsmiddel som vand, mens der er en lav opløselighed i det upolære octan-1-ol. Derfor vil D være lille ved lave pH-værdier, som det fremgår af (pH,log K)-diagrammet. Her kan det også aflæses, at ved høje pH-værdier er $\log D \approx -0,9$, det vil sige, at $D \approx 0,1$. Når pH hæves fra helt lave til høje pH-værdier, vil $\log D$ aftage meget, når $pK_s = 4,90$ passerer. Det skyldes, at omdannelsen af det neutrale octansyremolekyle til det negativt ladede octanoat hovedsageligt sker i det ret snævre interval, som ligger omkring $pH = pK_s$.

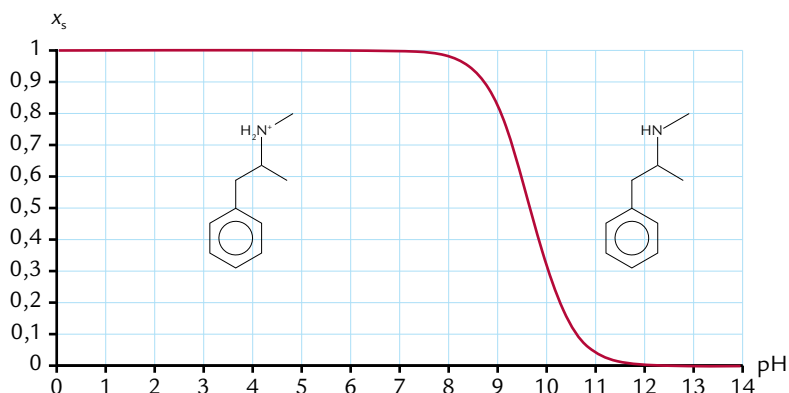
87. Methamfetamin har strukturformlen:



- Propankædens carbonatomer er nummereret fra 1 til 3. På carbonatom nr. 1 er bundet en phenylgruppe, deraf navnet 1-phenylpropan. På carbonatom nr. 2 er bundet et N-atom, som gør molekylet til en amin; molekylnavnet skal derfor slutte med propan-2-amin. Til aminogrupperens N-atom er bundet en methylgruppe, og dette angives i navnet som N-methyl. Tilsammen bliver navnet N-methyl-1-phenylpropan-2-amin, idet sidegrupperne skal opskrives i alfabetisk rækkefølge.
- Carbonatom nr. 2 er asymmetrisk, derfor bliver der to spejlbilled-isomere former af methamfetamin.
- Der er en hydrofil N-H-gruppe, mens resten af molekylet er hydrofob. Der er en overvægt af hydrofobe grupper, derfor er methamfetamin i overvejende grad upolært.
- Methamfetamin optager en hydron, og herved dannes den korresponderende syre, som er en positiv ion:

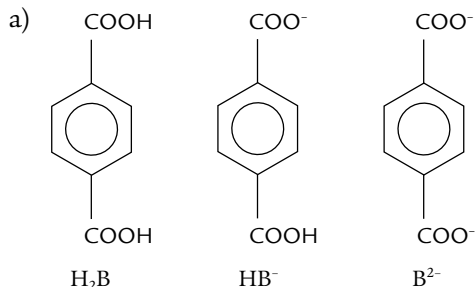


e) $pK_s = 9,9$ (for methamfetamins syreform)



- f) Hvis pH er noget under pK_s -værdien, vil methamfetamin stort set være helt omdannet til den korresponderende syre, som er en positiv ion. Det giver den en stærkt polær karakter, der vil gøre den letopløselig i et polært opløsningsmiddel som vand, mens der er en lav opløselighed i det upolære octan-1-ol. Derfor er D lav, når pH er noget under pK_s -værdien, dvs. under ca. $pH = 8$. Af $(pH, \log D)$ -diagrammet aflæses ved lave pH-værdier, at $\log D \approx -1$, dvs. $D = 0,1$. Hvis pH er noget over pK_s -værdien, dvs. over ca. $pH = 12$, vil methamfetamin stort set være helt omdannet til det neutrale molekyle, som primært har upolær karakter og derfor vil have lav opløselighed i et polært opløsningsmiddel som vand. Men det vil være letopløseligt i det upolære octan-1-ol. Derfor er D høj, når pH er noget over ca. $pH = 12$. Af $(pH, \log D)$ -diagrammet aflæses ved høje pH-værdier, at $\log D \approx 2,1$, dvs. $D = 130$. Når pH hæves fra helt lave værdier til høje pH-værdier, vil $\log D$ aftage meget, når $pK_s = 9,9$ passerer. Dette skyldes, at omdannelsen af den positivt ladede syreform af methamfetamin omdannes til det neutrale methamfetaminmolekyle. Det sker især i det ret snævre interval, som ligger omkring $pH = pK_s$.
- g) Ved $pH = 7,4$ aflæses $\log D = -0,4$, dvs. $D = 0,40$. Da D er relativt nær ved 1, betyder det, at en del (ca. 29 %) af amfetaminen findes på det neutrale og upolære molekyle. Da blod-hjerne-barrieren er upolær, kan den neutrale form af amfetamin opløses i barrieren og dermed relativt let passere den.

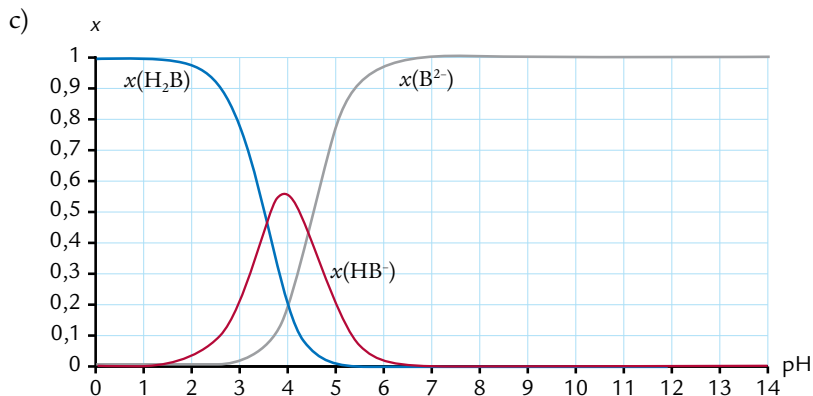
88.



b) For H_2B : $x(H_2B) = \frac{n(H_2B)}{n(H_2B) + n(HB^-) + n(B^{2-})}$

For HB^- : $x(HB^-) = \frac{n(HB^-)}{n(H_2B) + n(HB^-) + n(B^{2-})}$

For B^{2-} : $x(B^{2-}) = \frac{n(B^{2-})}{n(H_2B) + n(HB^-) + n(B^{2-})}$



d) pH = 2:

$$x(H_2B) = 0,97$$

$$x(HB^-) = 0,03$$

$$x(B^{2-}) = 0,00$$

I en vandig opløsning af 1,4-dibenzendicarboxylsyre ved pH = 2 findes næsten udelukkende det neutrale molekyle, kun ca. 3 % af ionen, hvor syren har afgivet en hydron, og praktisk taget intet af ionen, hvor syren har afgivet 2 hydroner.

e) pH = 5:

$$x(H_2B) = 0,01$$

$$x(HB^-) = 0,18$$

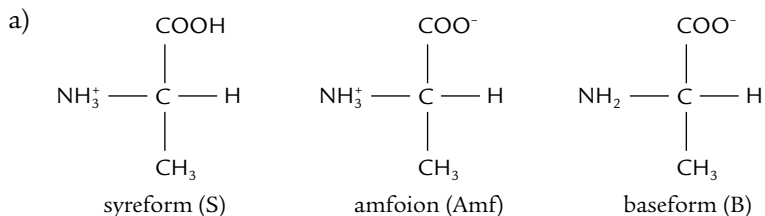
$$x(B^{2-}) = 0,81$$

I en vandig opløsning af 1,4-dibenzendicarboxylsyre ved pH = 5 findes der næsten intet (1 %) af det neutrale molekyle, ca. 18 % af ionen, hvor syren har afgivet en hydron, og en stor mængde (81 %) af ionen, hvor syren har afgivet 2 hydroner.

f) $\text{pH} = 7$:
 $x(\text{H}_2\text{B}) = 0,00$
 $x(\text{HB}^-) = 0,00$
 $x(\text{B}^{2-}) = 1,00$

I en vandig opløsning af 1,4-dibenzendicarboxylsyre ved $\text{pH} = 7$ findes der praktisk taget intet af det neutrale molekyle, H_2B , og af ionen, HB^- , hvor syren har afgivet en hydron, mens næsten alle syremolekyler er blevet omdannet til ionen B^{2-} , hvor syren har afgivet 2 hydroner.

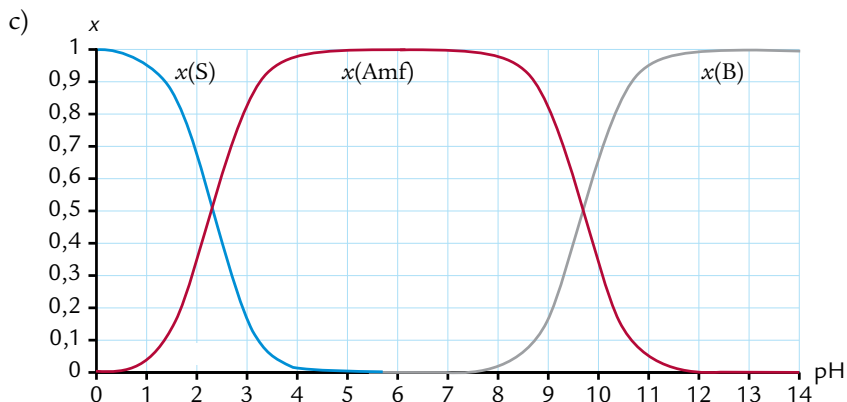
89.



b) For syreformen S: $x(\text{S}) = \frac{n(\text{S})}{n(\text{S}) + n(\text{Amf}) + n(\text{B})}$

For amfoionen Amf: $x(\text{Amf}) = \frac{n(\text{Amf})}{n(\text{S}) + n(\text{Amf}) + n(\text{B})}$

For baseformen B: $x(\text{B}) = \frac{n(\text{B})}{n(\text{S}) + n(\text{Amf}) + n(\text{B})}$



d) $\text{pH} = 1$:
 $x(\text{S}) = 0,96$
 $x(\text{Amf}) = 0,04$
 $x(\text{B}) = 0,00$

I en vandig opløsning ved $\text{pH} = 1$ findes L-alanin næsten udelukkende som den positivt ladede syreform (96 %), mens kun 4 % er til stede som amfoion. Der er stort set intet af baseformen i opløsningen.

e) $\text{pH} = 2,5$:

$$x(\text{S}) = 0,40$$

$$x(\text{Amf}) = 0,60$$

$$x(\text{B}) = 0,00$$

I en vandig opløsning ved $\text{pH} = 2,5$ findes L-alanin fordelt med 40 % som den positivt ladede syreform og 60 % som den neutralt ladede amfoion. Der er stort set intet af baseformen i opløsningen.

f) $\text{pH} = 7$:

$$x(\text{S}) = 0,00$$

$$x(\text{Amf}) = 1,00$$

$$x(\text{B}) = 0,00$$

I en vandig opløsning ved $\text{pH} = 7$ findes L-alanin i praksis kun som den neutralt ladede amfoion.

g) $\text{pH} = 12$:

$$x(\text{S}) = 0,00$$

$$x(\text{Amf}) = 0,01$$

$$x(\text{B}) = 0,99$$

I en vandig opløsning ved $\text{pH} = 12$ findes L-alanin næsten udelukkende som den negativt ladede baseform (99 %), mens kun 1 % er til stede som amfoion. Der er stort set intet af syreformen i opløsningen.