

# TENTAMEN ORGANISCHE CHEMIE 1

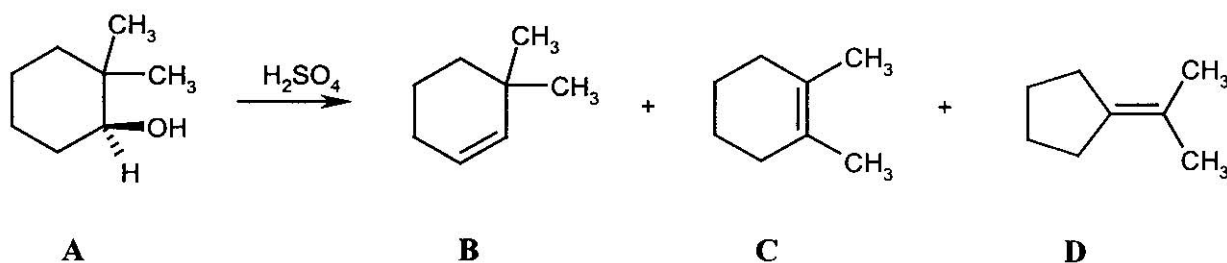
23 maart 2005

1. a. Teken ruimtelijk de volgende moleculen: ethaan, etheen, ethyn en benzeen. Geef de hybridisatiegraad aan, het type binding en de hoeken.

b. Geef de structuurformules (inclusief vrije elektronenparen alsmede de  $\delta+$  en  $\delta-$  ladingen) van de volgende functionele groepen:

1) ester, 2) secundair amine, 3) aldehyde, 4) alkylchloride, 5) thiol.

2. Bij de reactie van verbinding A met geconcentreerd zwavelzuur ontstaat er een mengsel van B, C en D.



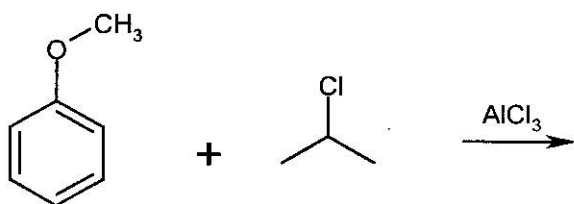
a. Geef de officiële naam voor verbinding A, inclusief stereochemie.

b. Teken verbinding A in de twee mogelijke stoelconformaties.

c. Geef in de stoelconformatie de axiale en equatoriale posities aan.

d. Geef duidelijke mechanismen voor de vorming van B, C en D.

3. Geef het mechanisme van onderstaande reactie en verklaar de vorming van het product of producten.

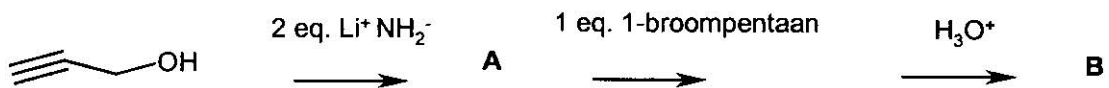


4. a. Welk product ontstaat bij de additie van water aan 2-methyl-buteen, geef mechanisme.

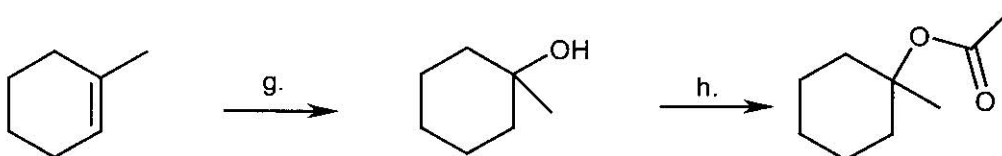
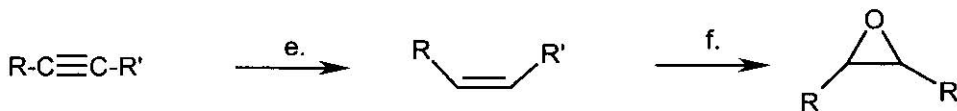
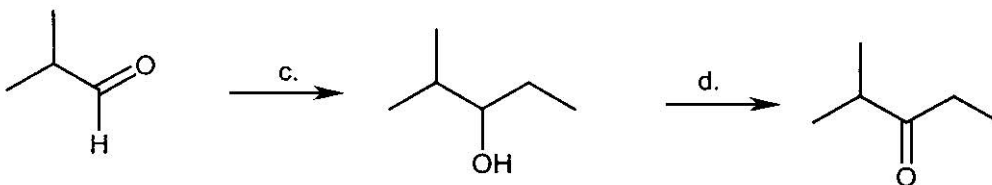
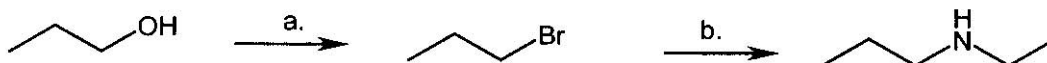
b. Welk product ontstaat bij de additie van water aan 2-butyln, geef mechanisme.

5. De verbinding 2-octyn-1-ol (**B**) wordt bereid door 2-propyn-1-ol te behandelen met 2 equivalenten lithiumamide ( $\text{LiNH}_2$ ) en het daaruit gevormde intermediair **A** met 1 equivalent 1-broompentaan. Het reaktiemengsel wordt tenslotte behandeld met zuur om de organische ionen in ongeladen verbindingen om te zetten.

Geef de reactievergelijkingen inclusief de mechanismen. Leg uit waarom 2 equivalenten lithiumamide en 1 equivalent broompentaan het beste resultaat geeft.



6. Geef voor de volgende reacties het **type reactie** aan en de **benodigde reagentia**. (Geen mechanisme).



7. Geef het **reactiemechanisme** (in een aantal stappen) van **6b**, **6c**, **6f** en **6h**.

8. Van een onbekende verbinding zijn de onderstaande spectra gemaakt (zie volgende pagina).  
Element analyse (gewichtspcenten): C 79,37%; H 8,88%; O 11,75%

Geef antwoord op de volgende vragen:

- Wat is de molecuul massa
- Wat is de brutoformule van het molecuul
- Bereken het aantal Dubbele Band Equivalenten
- Zijn er in het IR aanwijzingen voor hydroxy, ester, carbonzuur, amide, amine etc.
- Geef mogelijke verklaringen voor de  $^{13}\text{C}$  signalen; plaats,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}$ ,  $\text{C}$ .
- Geef mogelijke verklaringen voor de chemical shift, integralen en opsplitsingspatronen van de  $^1\text{H}$  signalen.
- Combineer bovenstaande punten en probeer een structuurformule op te stellen.
- Geef aan welke NMR signalen bij welke C- en welke H-atomen horen.

### $^1\text{H-NMR}$ (ppm)

0.7-1.4	$\text{RCH}_3$
1.1-2.0	$\text{RCH}_2\text{R}$
1.4-2.0	$\text{R}_3\text{CH}$
1.4-2.3	$\text{CH}_3\text{C}=\text{C}$
1.7-2.4	$\text{CH}_2\text{C}=\text{C}$
1.7-2.9	$\text{CHC}=\text{C}$
1.8-3.0	$\text{CHC}=\text{O}$
1.8-3.1	H alkyn
2.1-4.4	CH-Hal
2.1-3.2	CH-Ar
2.2-3.6	CH-N
3.2-4.4	$\text{CH}_{2,3}\text{-O-}$
3.5-5.3	$\text{R}_2\text{CH-O-}$
4.6-6.4	H-C=C
5.8-7.7	H-C=C-C=C
6.5-8.5	H-Arom.
9.1-10	Aldehyde
10-13	COOH

### $^{13}\text{C-NMR}$ (ppm)

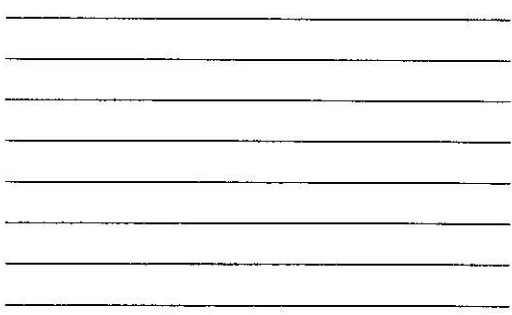
13-16	$\text{RCH}_2\text{CH}_3$
16-25	$\text{RCH}_2\text{CH}_3$
~20	$\text{CH}_3\text{COOR}$
15-38	$\text{R}_3\text{CH}$
18-35R	$\text{CH}_2\text{Br}$
~30	$\text{CH}_3\text{C}=\text{O}$
37-45	$\text{RCH}_2\text{Cl}$
40-70	$\text{RCH}_2\text{-O-}$
50-64	$\text{RCH}_2\text{OH}$
75-95	$\text{RC}\equiv\text{CR}$
115-120	$\text{RCH}=\text{CH}_2$
125-140	$\text{RCH}=\text{CH}_2$
115-125	$\text{RC}\equiv\text{N}$
125-150	Aromatic
160-175	$\text{RCOOR}$
172-185	$\text{RCOOH}$
185-205	Aldehyde
205-225	Ketone

### IR

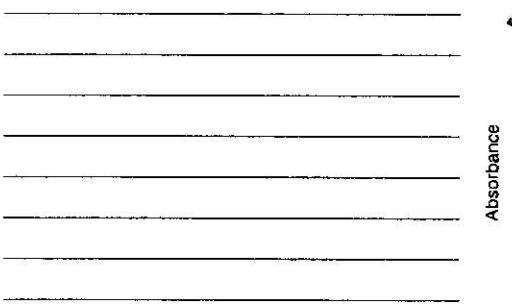
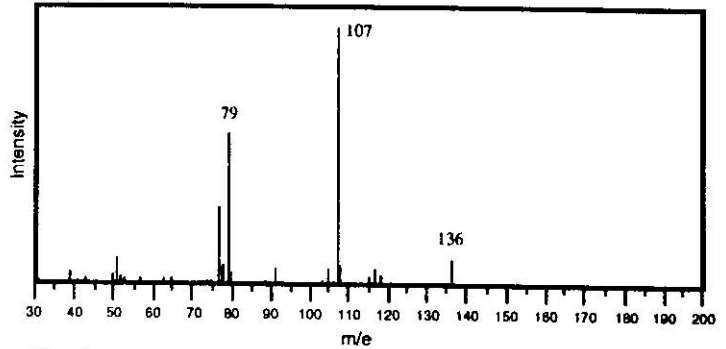
3650-3590 (v)	OH alcohol, not H bonded
3600-3200 (v,br)	OH alcohol, H bonded
3500-3350 (m)	NH amide
3500-3300 (m)	NH amine
3310-3290 (s)	CH alkyn
3100-3000 (v)	CH aromatic
3080-3020 (m)	CH alkene
3000-2500 (s,br)	OH acids
2960-2850 (s)	CH alkane
2900-2700 (m)	CH aldehyde
2260-2220 (v)	CN nitrile
2260-2100 (v)	CC alkyn
1750-1735 (s)	CO ester
1740-1720 (s)	CO aldehyde
1725-1705 (s)	CO ketone
1725-1700 (s)	CO acid
1700-1680 (s)	CO aryl ketone
1690-1650 (s)	CO amide
1685-1665 (s)	CO $\alpha,\beta$ -unsat. ketone
1680-1620 (v)	CC alkene
1655-1510 (s)	OH acids
1620-1590 (v)	OH alcohol, H bonded
1600-1450 (v)	CC aromatic
1560-1515 (s)	$\text{NO}_2$ nitro
1470-1350 (s)	CH alkane
1385-1345 (s)	$\text{NO}_2$ nitro
1360-1250 (s)	NH amine, aromatic
1300-1000 (s)	CO alc., ether, ester
1220-1020 (w)	CN amine, alkyl

s = strong absorption  
m = medium absorption  
w = weak absorption  
v = variable absorption  
br = broad

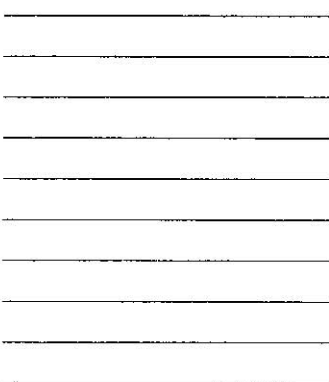
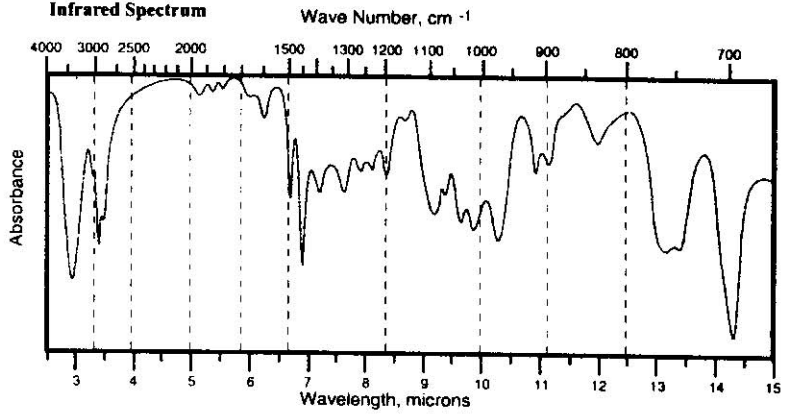
**Veel succes!**



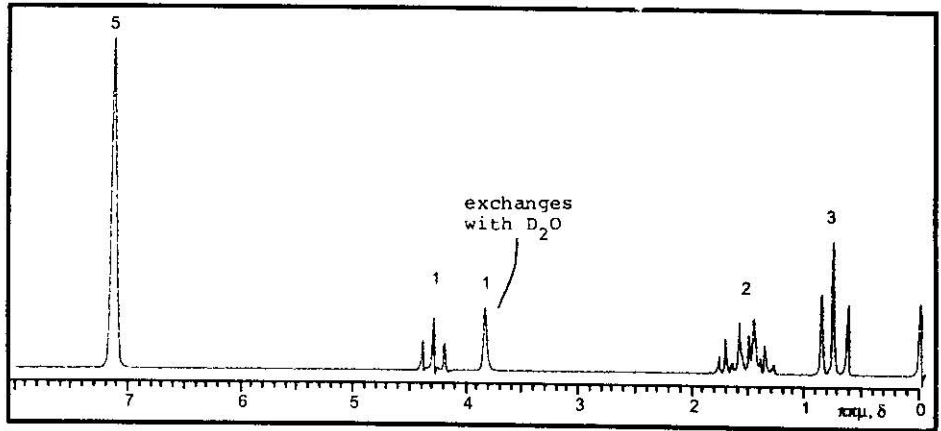
Mass Spectrum



Infrared Spectrum



<sup>1</sup>H NMR



<sup>13</sup>C Spectral Data:

