

19-12-2019

Tijsduur; 2.5 uur

Toets 2, Organische Chemie en Structuuranalyse

Naam:

Studentennummer:

LET OP

- Zonder naam & nummer zal de toets niet worden nagekeken.
- Wanneer de kleur rood en/of een potlood wordt gebruikt zal de toets niet worden nagekeken.
- Vereist is dat de onderdelen a, b, c, enzovoort van elke vraag duidelijk zijn aangegeven.
- Vereist is dat de structuren van het juiste nummer zijn voorzien.

1abcd	1efg	2abcde	3abcde	4abcd	5
19/30		14/15	13/15	17/25	15/15

+ ↗

78/100

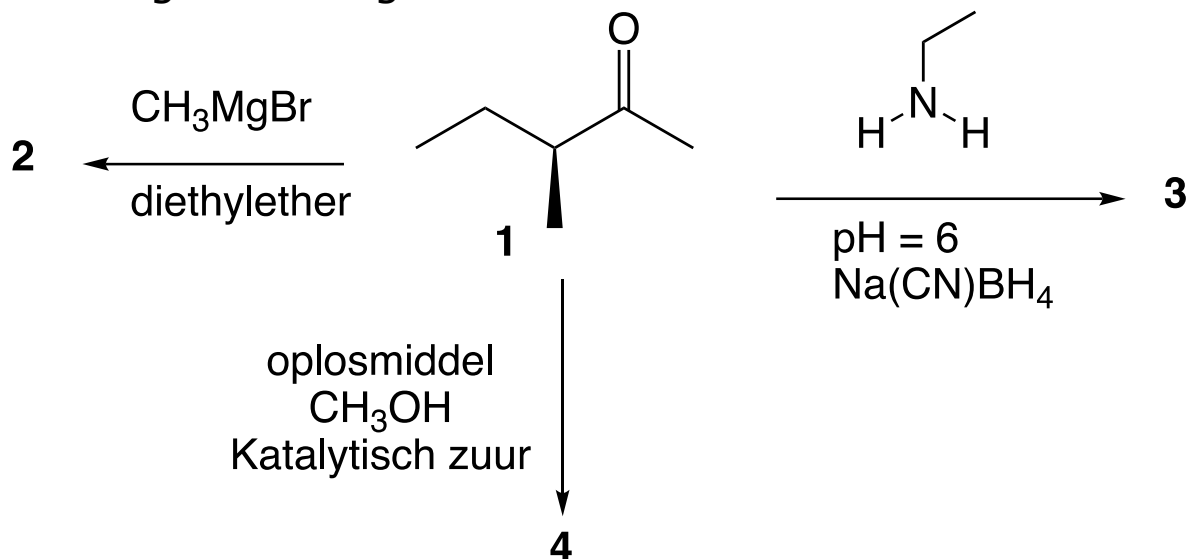
met notitie

1 H 1.00794																2 He 4.002602	
3 Li 6.941	4 Be 9.012182											5 B 10.811	6 C 12.0107	7 N 14.00674	8 O 15.9994	9 F 18.9984032	10 Ne 20.1797
11 Na 22.989770	12 Mg 24.3050											13 Al 26.581538	14 Si 28.0855	15 P 30.973761	16 S 32.066	17 Cl 35.4527	18 Ar 39.948
19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.955910	22 Ti 47.867	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.938049	26 Fe 55.845	27 Co 58.933200	28 Ni 58.6534	29 Cu 63.545	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.92160	34 Se 78.96	35 Br 79.504	36 Kr 83.80
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.90585	40 Zr 91.224	41 Nb 92.90638	42 Mo 95.94	43 Tc (98)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.90550	46 Pd 106.42	47 Ag 196.56655	48 Cd 112.411	49 In 114.818	50 Sn 118.710	51 Sb 121.760	52 Te 127.60	53 I 126.90447	54 Xe 131.29
55 Cs 132.90545	56 Ba 137.327	57 La 138.9055	72 Hf 178.49	73 Ta 180.94.79	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.217	78 Pt 195.078	79 Au 196.56655	80 Hg 200.59	81 Tl 204.3833	82 Pb 207.2	83 Bi 208.58038	84 Po (209)	85 At (210)	86 Rn (222)
87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	104 Rf (261)	105 Db (262)	106 Sg (263)	107 Bh (262)	108 Hs (265)	109 Mt (266)	110 (269)	111 (272)	112 (277)		114 (289) (287)		116 (289)		118 (293)

58 Ce 140.116	59 Pr 140.50765	60 Nd 144.24	61 Pm (145)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.964	64 Gd 157.25	65 Tb 158.92534	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93032	68 Er 167.26	69 Tm 168.93421	70 Yb 173.04	71 Lu 174.967
90 Th 232.0381	91 Pa 231.035888	92 U 238.0289	93 Np (237)	94 Pu (244)	95 Am (243)	96 Cm (247)	97 Bk (247)	98 Cf (251)	99 Es (252)	100 Fm (257)	101 Md (258)	102 No (259)	103 Lr (262)

Vraag 1 (3 + 4 + 5 + 3 + 5 + 5 + 5 = 30 punten)

Verbinding **1** wordt gebruikt voor drie reacties.

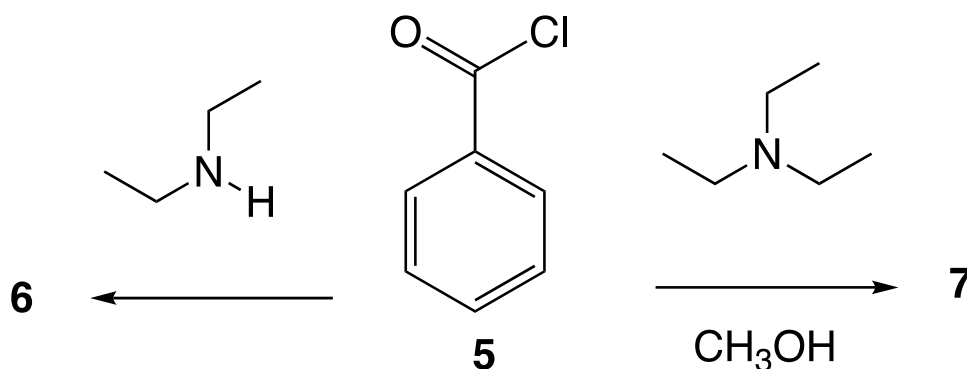


- Benoem de configuratie (R of S) van het chirale centrum in **1**.
- Teken de structuur van het enantiomeer van **1**.
- Teken de structuur, inclusief de stereochemie van product **2**. Is product **2** één enantiomeer, een racemisch mengsel of een mengsel van diastereoisomeren?
- De reactie naar **2** is gevoelig voor water. Leg de reden uit met behulp van een reactie.
- Teken de structuur, inclusief de stereochemie van product **3**. Is product **3** één enantiomeer, een racemisch mengsel of een mengsel van diastereoisomeren?
- Teken de structuur, inclusief de stereochemie van product **4**. Is product **4** één enantiomeer, een racemisch mengsel of een mengsel van diastereoisomeren?
- Geef het mechanisme van de reactie naar **4**.

Antwoord vraag 1 (geef de onderdelen a, b, c, d, e, f en g duidelijk aan geef de structuren het juiste nummer)

Vraag 2(4 + 2 + 2 + 4 + 3 = 15 punten)

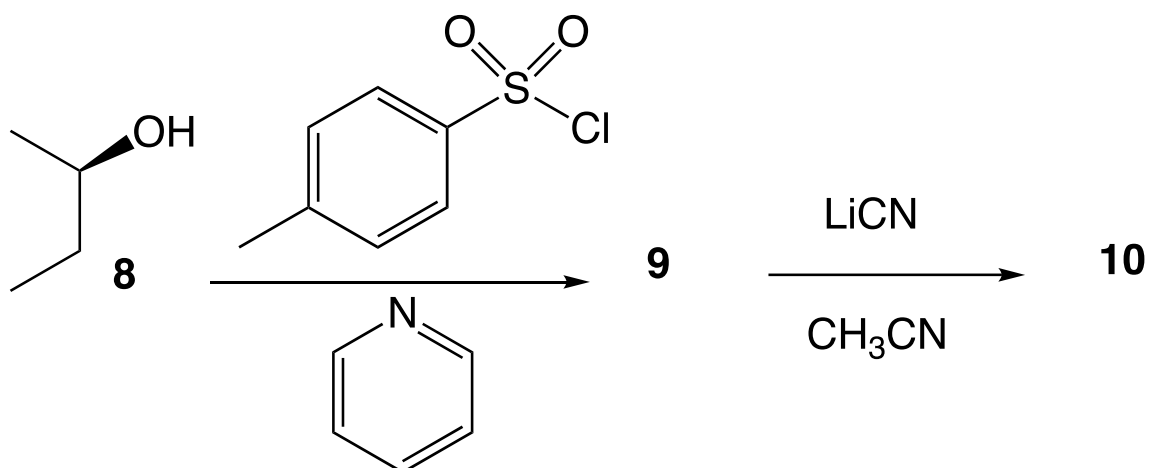
Verbinding **5** wordt gebruikt voor twee reacties.



- Teken de structuur van product **6**.
- Benoem de functionele groep van het nucleofiel in de reactie naar **6**.
- Hoeveel equivalenten diethylamine zijn nodig om **6** in voldoende opbrengst te verkrijgen.
- Teken de structuur van product **7**.
- Geef het mechanisme van de reactie reactie naar **7**.

Antwoord vraag 2 (geef de onderdelen a, b, c, d en e duidelijk aan en geef de structuren het juiste nummer)

vraag 3 (3 + 4 + 2 + 4 +2 =15 punten)

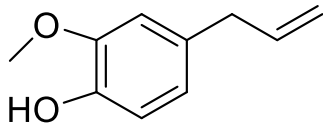


- Benoem de configuratie (R of S) van het chirale centrum in **8**.
- Teken de structuur, inclusief de stereochemie van product **9**.
- Geef het mechanisme van de reactie naar **9**.
- Teken de structuur, inclusief de stereochemie van product **10**.
- Geef het mechanisme van de reactie naar **10**.

Antwoord vraag 2 (geef de onderdelen a, b, c, d en e) duidelijk aan en geef de structuren het juiste nummer)

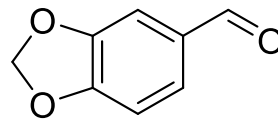
Vraag 4 (2+13+4+6 = 25 punten)

Chemicus Gijs wil graag een wintertaart maken, maar kan niet bakken en kiest voor een chemische aanpak. Daartoe koopt hij op straat een zakje "kruidenmix". Hij weet niet precies de samenstelling van de mix.



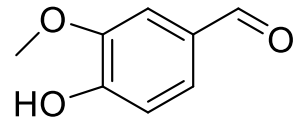
Eugenol

*kruidnagel
nootmuskaat
gember
laurier
kaneel
basilicum
citroenmelisse
dille
alsem
steranijs*



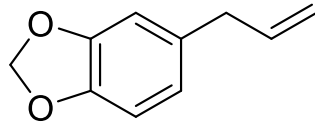
Piperonal

*dille
viooltjes
zwarte peper
vanille*



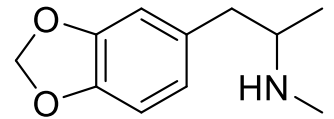
Vanilline

vanille



Safrol

*anijszaad
kaneel
nootmuskaat
zwarte peper
sassefras*



MDMA

A) Met welke techniek kan Gijs de onderlinge moleculaire verhoudingen van bovenstaande vijf stoffen die voorkomen in de kruidenmix het beste analyseren. (omcirkel het juiste antwoord)

- | | |
|---------------------------------------|------------------------------------|
| a. IR-spectroscopie | d. ^1H -NMR spectroscopie |
| b. UV-Vis spectroscopie | e. Massaspectrometrie |
| c. ^{13}C -NMR spectroscopie | f. X-ray Diffractie |

B) Ken het ^1H - en ^{13}C -NMR spectrum volledig toe van **Eugenol**. Geef je toekenning aan op de spectra (Bijlage 1).

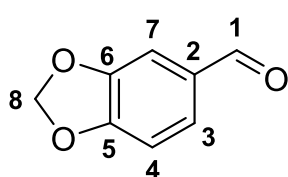
C) Geef twee karakteristieke IR absorpties van **Vanilline** (functionele groep en golfgetal)

Antwoord vraag 1C:

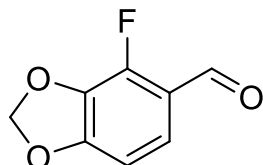
vervolg vraag 1

In de kruidenmix zit per ongeluk **fluoro**-piperonal. De volgende $^1\text{H-NMR}$ gegevens horen bij die verbinding.

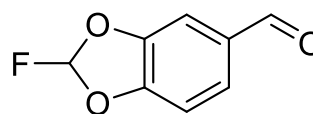
$^1\text{H NMR}$	Toekenning
6.05 ppm (s, 2H)	
6.61 ppm (d, 1H, $J_{\text{HF}}=9.8$ Hz)	
7.19 ppm (d, 1H, $J_{\text{HF}}=5.4$ Hz)	
10.15 ppm (s, 1H)	



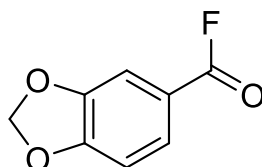
Piperonal



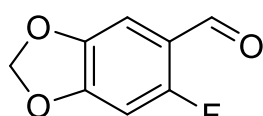
Isomeer F7



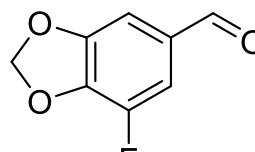
Isomeer F8



Isomeer F1



Isomeer F3



Isomeer F4

D) Bepaal aan de hand van de NMR gegevens welke H is vervangen voor F (isomeer **F1**, **F3**, **F4**, **F7** of **F8**), door de bovenstaande tabel verder in te vullen en de juiste verbinding te omcirkelen. Beargumenteer je keuze. Geen uitleg = geen punten.

Antwoord vraag 1D:

Vraag 5 (15 punten)

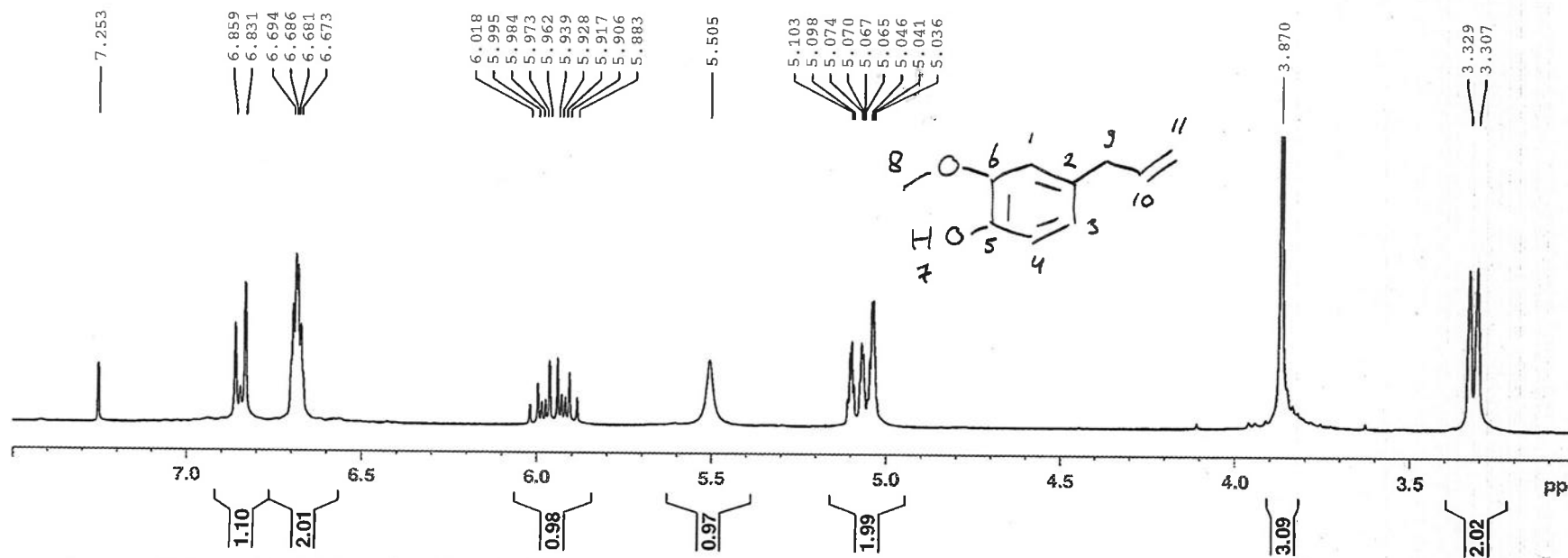
Gijs mist nog een *aromatische* geurstof uit bepaalde winterplanten. Zijn kruidenboer voorziet hem van een stofje ($C_8H_8O_3$) waarvan de spectroscopische gegevens (1H , ^{13}C , IR) in **Bijlage 2** staan.

Helder de structuur op van het stofje, laat voldoende bewijsvoering zien.

Uitwerking vraag 2:

Bijlage 1

eugenol 1H (300 MHz, CDCl3)

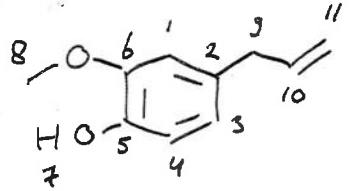


Current Data Parameters
 NAME Stefani219
 EXPNO 1
 PROCNO 1

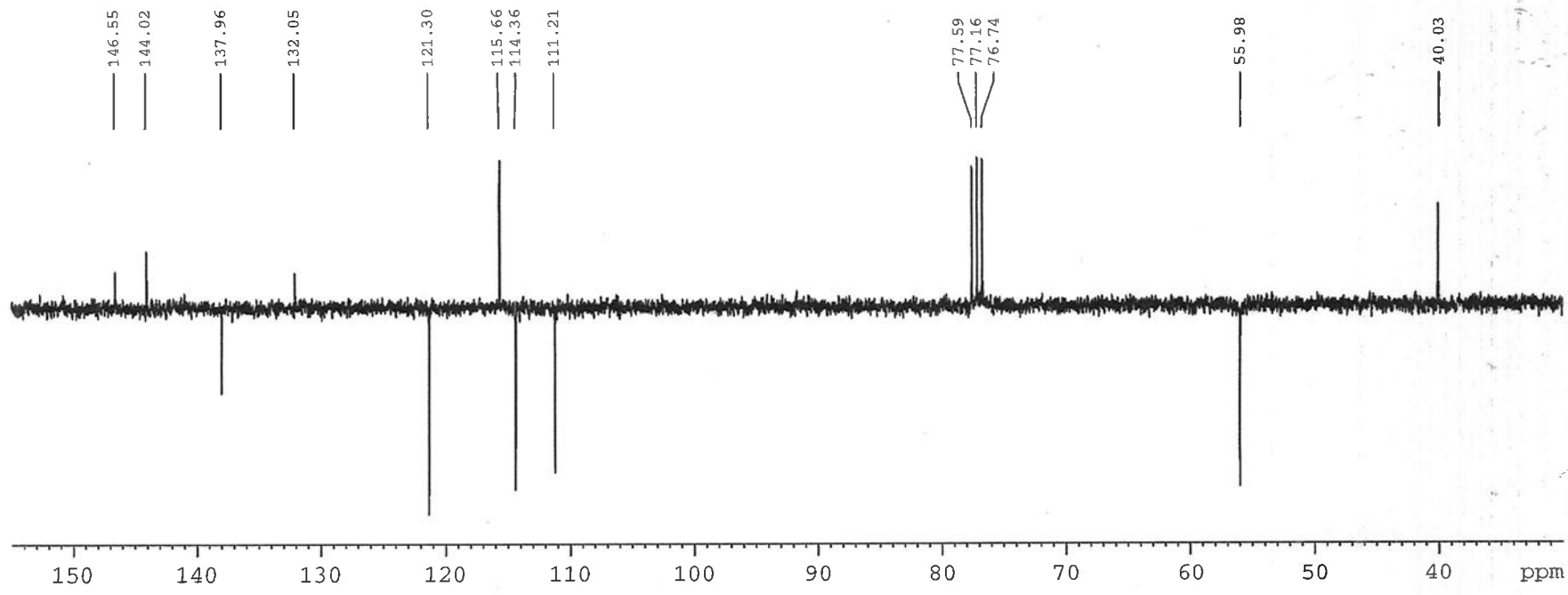
F2 - Acquisition Parameters
 Date_ 20191206
 Time 7.56
 INSTRUM dpx_300
 PROBED 5 mm PABBO BB/
 PULPROG zg
 TD 66134
 SOLVENT CDCl3
 NS 16
 DS 0
 SWH 6613.757 Hz
 FIDRES 0.100005 Hz
 AQ 4.9998560 sec
 RG 228.1
 DW 75.600 use
 DE 5.50 use
 TE 294.0 K
 D1 0.10000000 sec
 TD0 1

==== CHANNEL f1 =====
 NUC1 1H
 P1 6.50 use
 PL1 0.00 dB
 SFO1 300.1315607 MHz

F2 - Processing parameters
 SI 65536
 SF 300.1300085 MHz
 WDW EM
 SSB 0
 LB 0.05 Hz
 GB 0
 PC 0.90



eugenol 13C APT (75 MHz, CDCl3)



Current Data Parameters
 NAME Stefani219
 EXPNO 3
 PROCNO 1

F2 - Acquisition Parameter
 Date_ 20191206
 Time 8.09
 INSTRUM dpx_300
 PROBED 5 mm PABBO BB/
 FULPROG jmod
 TD 32768
 SOLVENT CDCl3
 NS 129
 DS 0
 SWH 18248.176 Hz
 FIDRES 0.556890 Hz
 AQ 0.8979206 se
 RG 5792.6
 DW 27.400 us
 DE 6.50 us
 TE 296.2 K
 CNST2 160.000000
 CNST11 1.000000
 D1 2.40000010 se
 d20 0.00625000 se
 DELTA 0.00000726 se
 TD0 1

==== CHANNEL f1 =====
 NUC1 13C
 P1 5.70 us
 P2 11.40 us
 PL1 0.00 dB
 SFO1 75.4757011 MHz

==== CHANNEL f2 =====
 CPDPRG2 waltz16
 NUC2 1H
 PCPD2 80.00 us
 PL2 0.00 dB
 PL12 18.00 dB
 SFO2 300.1315011 MHz

F2 - Processing parameters

Bijlage 2

^1H NMR, 400 MHz

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ

10.75 (s, 1H), [Wisselt uit met D_2O]

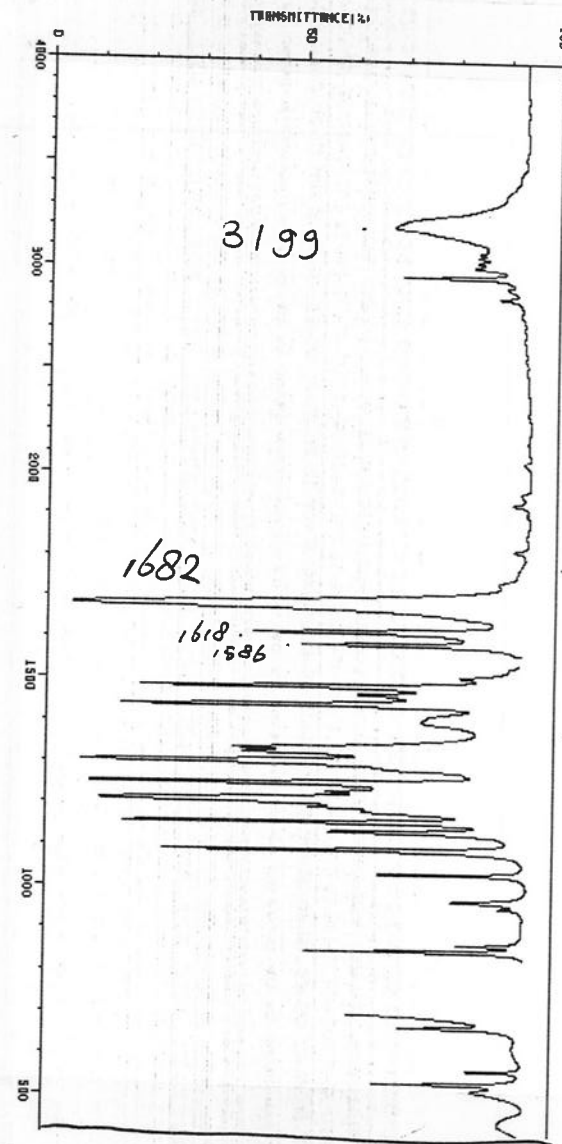
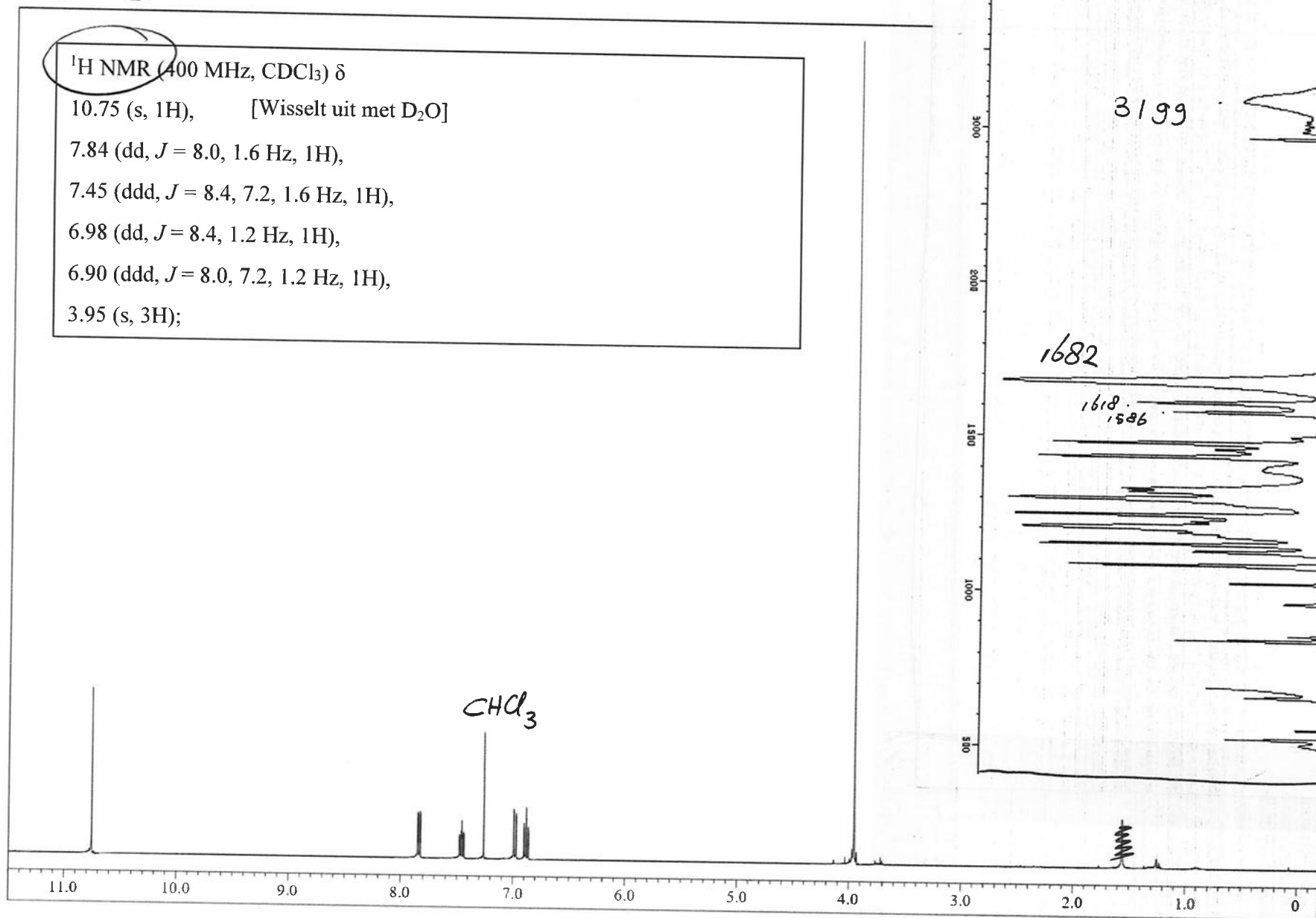
7.84 (dd, $J = 8.0, 1.6$ Hz, 1H),

7.45 (ddd, $J = 8.4, 7.2, 1.6$ Hz, 1H),

6.98 (dd, $J = 8.4, 1.2$ Hz, 1H),

6.90 (ddd, $J = 8.0, 7.2, 1.2$ Hz, 1H),

3.95 (s, 3H);



^{13}C NMR 100 MHz

