**Tehtävien ratkaisut**

Jakso 3 Orgaanisten yhdisteiden mallintaminen ja rakennetutkimus

2. Ratkaise yhdisteen suhdekaava, kun

a) n(C) = 0,0130 mol, n(H) = 0,0390 mol ja n(O) = 0,0065 mol

b) m(C) = 72,06 g ja m(H) = 6,048 g

c) m-%(C) = 40,0 %, m-%(H) = 6,7 % ja m-%(O) = 53,3 %

**Ratkaisu:**

a) n(C) = 0,0130 mol

 n(H) = 0,0390 mol

 n(O) = 0,0065 mol

Jaetaan kukin ainemäärä pienimmällä ainemäärällä eli tässä tapauksessa hapen ainemäärällä (0,0065 mol):

 

 

 

Ainemäärien kokonaislukusuhde on: n(C) : n(H) : n(O) = 2 : 6 :1.

Suhdekaava on (C2H6O)x.

b) m(C) = 72,06 g

 m(H) = 6,048 g

 M(C) = 12,01 g/mol

 M(H) = 1,008 g/mol

Ratkaistaan yhdisteessä olevien hiiliatomien ja vetyatomien ainemäärät:

 

Ainemäärien kokonaislukusuhde on n(C) : n(H) = 1:1.

Suhdekaava on (CH)x.

c) m−%(C) = 40,0 %

 m−%(H) = 6,7 %

 m−%(O) = 53,3 %

 M(C) = 12,01 g/mol
 M(H) = 1,008 g/mol
 M(O) = 16,00 g/mol

Valitaan näytteen massaksi 100 g. Massaprosenttisten osuuksien perusteella eri alkuaineatomien massat ovat

 m(C) = 40,0 g
 m(H) = 6,7 g

 M(O) = 53,3 g

Alkuaineatomien ainemäärät ovat



Jaetaan kukin ainemäärä pienimmällä ainemäärällä eli tässä tapauksessa hiilen ainemäärällä (3,3306 mol):

 

 



Ainemäärien kokonaislukujen suhteeksi saadaan: n(C) : n(H) : n(O) ≈ 1 : 2 : 1.

Suhdekaava on (CH2O)x

3. Metyylibentsoaatti on hyväntuoksuinen esteri, jota käytetään hajuvesiteollisuudessa. 5,325 grammaa tätä ainetta sisältää 3,758 grammaa hiiltä, 0,316 grammaa vetyä ja 1,251 grammaa happea. Ratkaise metyylibentsoaatin suhdekaava.

**Ratkaisu:**

 m(C) = 3,758 g

 m(H) = 0,316 g

 m(O) = 1,251 g

 M(C) = 12,01 g/mol
 M(H) = 1,008 g/mol
 M(O) = 16,00 g/mol

 Eri alkuaineatomien ainemäärät ovat

 

 Jaetaan kukin ainemäärä pienimmällä ainemäärällä eli tässä tapauksessa hapen ainemäärällä (0,0781875 mol):

 

 

 

Pienimpien kokonaislukujen suhteeksi saadaan: n(C) : n(H) : n(O) ≈ 4 : 4 : 1

Suhdekaava on (C4H4O)x.

4. Eräs orgaaninen yhdiste sisälsi hiiltä, vetyä ja happea. Kun 0,100 g tätä yhdistettä poltettiin, syntyi palamistuotteina 0,228 g hiilidioksidia ja 0,0931 g vettä. Ratkaise yhdisteen suhdekaava.

**Ratkaisu:**

 m(yhdiste) = 0,100 g

 m(CO2) = 0,228 g

 m(H2O) = 0,0931 g

 M(CO2) = 44,01 g/mol

 M(H2O) = 18,016 g/mol

 M(C) = 12,01 g/mol

 M(H) = 1,008 g/mol

 M(O) = 16,00 g/mol

Yhdisteessä olevien hiili- ja vetyatomien ainemäärä saadaan selville ratkaisemalla palamisreaktiossa muodostuneen hiilidioksidin ja veden ainemäärä. Koska yksi mooli hiilidioksidia CO2 sisältää yhden moolin hiiliatomeja, on yhdisteen hiiliatomien ainemäärä sama kuin muodostuvan hiilidioksidin ainemäärä eli

n(C) = n(CO2).



Yhdisteen vetyatomien ainemäärä puolestaan saadaan ratkaistua muodostuneen veden ainemäärästä, sillä yhdessä moolissa vesimolekyylejä H2O on kaksi moolia vetyatomeja eli n(H) = 2 ⋅ n(H2O).



Koska yhdisteen tiedetään sisältävän myös happea, saadaan happiatomien massa vähentämällä yhdisteen kokonaismassasta hiili- ja vetyatomien massat.







Ratkaistaan suhdekaavaa varten happiatomien ainemäärä



Eri alkuaineatomien ainemäärät ovat:

 n(C) = 0,0051806 mol

 n(H) = 0,010335 mol

 n(O) = 0,0017102 mol

Kun kaikki ainemäärät jaetaan pienimmällä (hapen) ainemäärällä, saadaan

n(C) : n(H) : n(O) = 3,0292 : 6,0432 : 1,000.

Muodostetaan ainemääristä pienin kokonaislukujen suhde, jolloin suhdekaavaksi saadaan (C3H6O)X.

5. Ratkaise yhdisteen molekyylikaava, kun

a) suhdekaava on (CH)x ja M(yhdiste) = 78 g/mol.

b) suhdekaava on (C3H6O)x ja suhteellinen molekyylimassa on noin 116.

**Ratkaisu:**

a) M(yhdiste) = 78 g/mol

 M(C) = 12,01 g/mol

 M(H) = 1,008 g/mol

Muodostetaan yhtälö suhdekaavaan (CH)x merkityn x:n ratkaisemiseksi:

 x ⋅ (M(C) + M(H)) = M(yhdiste)

Sijoitetaan yhtälöön moolimassojen lukuarvot ja ratkaistaan x:

 x ⋅ (12,01 + 1,008) = 78, josta

 13,018x = 78

 x = 5,992 ≈ 6

Molekyylikaava on C6H6.

b)Mr(yhdiste) = 116

 Ar(C) = 12,01

 Ar(H) = 1,008

 Ar(O) = 16,00

Muodostetaan yhtälö suhdekaavaan (C3H6O)x merkityn x:n ratkaisemiseksi:

 x ⋅ (3 ⋅Ar(C) + 6⋅ Ar(H) + Ar(O)) = Mr(yhdiste)

Sijoitetaan yhtälöön suhteellisten atomimassojen ja suhteellisen molekyylimassan lukuarvot ja ratkaistaan x:

 x ⋅ (3⋅12,01 + 6⋅1,008+16,00) = 116, josta

 58,078 x = 116

 x = 1,997 ≈ 2

Molekyylikaava on C6H12O2.

6. Kurkkupastilleissa käytettävä mentoli sisältää vain hiiltä, vetyä ja happea. Kun 0,1005 grammaa mentolia

poltettiin, syntyi 0,2829 grammaa hiilidioksidia ja 0,1159 grammaa vettä.

a) Ratkaiset mentolin suhdekaava.

b) Ratkaise mentolin molekyylikaava, kun sen moolimassan tiedetään olevan 156 g/mol.

**Ratkaisu:**

a) m(näyte) = 0,1005 g

 m(CO2) = 0,2829 g

 m(H2O) = 0,1159 g

 M(CO2) = 44,01 g/mol

 M(H2O) = 18,016 g/mol
 M(H) = 1,008 g/mol
 M(C) = 12,01 g/mol

 M(O) = 16,00 g/mol

Lasketaan mentolissa olevien hiiliatomien ainemäärä palamisrektiossa muodostuneen hiilidioksidin ainemäärän avulla:

 

Lasketaan mentolissa olevien vetyatomien ainemäärä palamisreaktiossa muodostuneen veden ainemäärän avulla:

 

Mentolin sisältämän hapen massa saadaan, kun näytteen massasta vähennetään hiilen ja vedyn massat: 

Ratkaistaan mentolissa olevien happiatomien ainemäärä

 

Merkitään eri alkuaineiden ainemäärien suhde

 n(C) : n(H) : n(O) = 0,00642808 mol : 0,0128663 mol : 6,45594 ⋅ 10−4 mol

Kun kukin ainemäärä jaetaan pienimmällä ainemäärällä eli hapen ainemäärällä (6,45594 ⋅ 10−4 mol),

saadaan: n(C) : n(H) : n(O) = 9,95685 mol : 19,9294 mol : 1,00000 mol, josta kokonaislukusuhde on

 n(C) : n(H) : n(O) ≈ 10 : 20 : 1

Mentolin suhdekaava on (C10H20O)x.

b) M(mentoli) = 156 g/mol

 M(C) = 12,01 g/mol

 M(H) = 1,008 g/mol

 M(O) = 16,00 g/mol

Ratkaistaan kerroin x yhtälöstä

 x ⋅ (10 ⋅ M(C) + 20 ⋅ M(H) + M(O)) g/mol = M(mentoli)

Sijoitetaan yhtälöön moolimassat:

 x ⋅ (10 ⋅ 12,01 + 20 ⋅ 1,008 + 16,00) g/mol = 156 g/mol

josta ratkaisuna x = 0,9983 ≈ 1.

Molekyylikaava on C10H20O.

10. Testosteroni (rakennekaava ohessa) on sukupuolihormoni, jota erittyy sekä miehillä että naisilla. Naisilla testosteronipitoisuudet ovat noin 1/10 verrattuna miesten vastaaviin pitoisuuksiin. Miehillä testosteronia erittyy vuorokaudessa muutamia milligrammoja.

a) Mihin testosteronin nimessä oleva pääte –oni viittaa.

b) Laske, mikä olisi testosteronikonsentraatio miehen veressä, jos testosteronia on 8,0 milligrammaa 4,5 litrassa verta.



**Ratkaisu:**

 a) Pääte –oni viittaa testosteronin rakenteessa olevaan karbonyyliryhmään (ketoryhmään). Yhdisteet, joissa on funktionaalisena ryhmänä ketoryhmä saavat nimeensä päätteen –oni.

b) m(testosteroni) = 8,0 mg = 0,0080 g

 V(veri) = 4,5 l

 M(testosteroni; C19H28O2) = 288,414 g/mol

 c(testosteroni) = ?

Ratkaistaan testosteronin ainemäärä suureyhtälöstä .



Ratkaistaan testosteronin konsentraatio suureyhtälöstä .



**Ylioppilastehtäviä**

2. Orgaaninen yhdiste sisältää vain hiiltä, vetyä ja happea. Kun 0,240 g yhdistettä poltettiin, syntyi täydellisessä palamisreaktiossa 0,352 g hiilidioksidia ja 0,144 g vettä.

 a) Määritä yhdisteen empiirinen kaava (suhdekaava). (3 p.)

 b) Mikä on yhdisteen molekyylikaava, kun sen suhteellinen molekyylimassa on noin 60? (1 p.)

 c) Kun yhdiste reagoi etanolin kanssa, väkevän rikkihapon katalysoidessa reaktiota, saatiin

 tuote, jolla on tunnusomainen tuoksu. Kirjoita reaktioyhtälö rakennekaavoin. (2 p.)
 (Yo kevät 2014)

**Ratkaisu:**

 m(yhdiste) = 0,240 g
 m(CO2) = 0,352 g
 m(H2O) = 0,144 g
 M(CO2) = 44,01 g/mol
 M(H2O) = 18,016 g/mol
 M(H) = 1,008 g/mol
 M(C) = 12,01 g/mol
 M(O) = 16,00 g/mol

 Ratkaistaan ensin palamisreaktiossa muodostuneen hiilidioksidin ainemäärä.

 Koska yhdessä moolissa hiilidioksidimolekyylejä on yksi mooli hiiliatomeja, on yhdisteen hiiliatomien ainemäärä n(C) sama kuin palamisreaktiossa muodostuneen hiilidioksidin ainemäärä n(CO2).

 

 Hiiliatomien ainemäärästä saadaan ratkaistua hiilen massa alkuperäisessä näytteessä.

 

 Yhdisteen vetyatomien ainemäärä saadaan ratkaistua palamisreaktiossa muodostuneen veden ainemäärän avulla. Yhdessä moolissa vesimolekyylejä on kaksi moolia vetyatomeja. Yhdisteen vetyatomien ainemäärän ja muodostuneen veden ainemäärän välille voidaan tällöin kirjoittaa verranto

 , josta n(H) = 2 ⋅ n(H2O)

 Ratkaistaan vetyatomien ainemäärä veden ainemäärän avulla

 

 Ratkaistaan yhdisteen vetyatomien massa seuraavasti:

 

 Koska yhdisteen tiedetään sisältävän myös happea, saadaan happiatomien massa vähentämällä yhdisteen massasta edellä ratkaistut hiili- ja vetyatomien massat.

 

 Ratkaistaan happiatomien ainemäärä

 

 Jaetaan kukin ainemäärä pienimmällä ainemäärällä (happi), jolloin saadaan

  1,0011 mol : 2,0001 mol : 1,0000 mol, joka voidaan pyöristää kokonaislukusuhteeksi 1:2:1.

 Suhdekaavaon (CH2O)x.

b) Mr(yhdiste) = 60

 Ratkaistaan suhdekaavaan merkitty x yhtälöstä

 

 x ⋅(12,01 + 2 ⋅ 1,008 + 16,00) = 60, josta saadaan

 30,026x = 60, ja ratkaisuna x ≈ 2.

 Molekyylikaava on C2H4O2.

c) Koska yhdiste reagoi etanolin kanssa, kyseessä on karboksyylihappo (karboksyylihappo ja alkoholi muodostavat esterin).

 Molekyylikaavan C2H4O2 perusteella yhdiste on etaanihappo. Kysytty reaktioyhtälö on

