

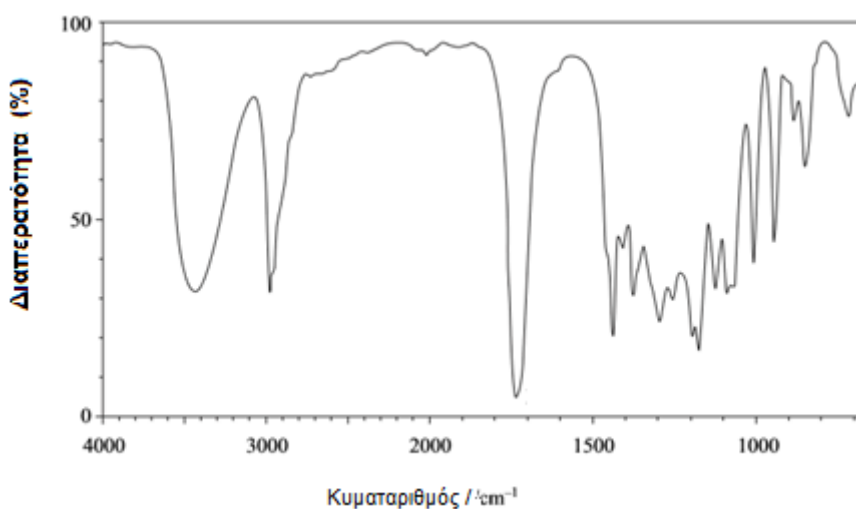
Ερώτηση 2

Κατά την επεξεργασία μιας αλειφατικής οργανικής ένωσης X με υδατικό διάλυμα υδροξειδίου του νατρίου, NaOH, σχηματίστηκαν δύο (2) οργανικά προϊόντα Ψ και Z. Το οργανικό προϊόν Z αντιδρά με διάλυμα HCl και δίνει την οργανική ένωση Φ.

Για την ένωση X δίνονται οι πιο κάτω πληροφορίες:

- Έχει μοριακό τύπο $C_7H_{14}O_3$
- Δίνεται επίσης το φάσμα υπερύθρου της ένωσης X.

Φάσμα υπερύθρου της ένωσης X.

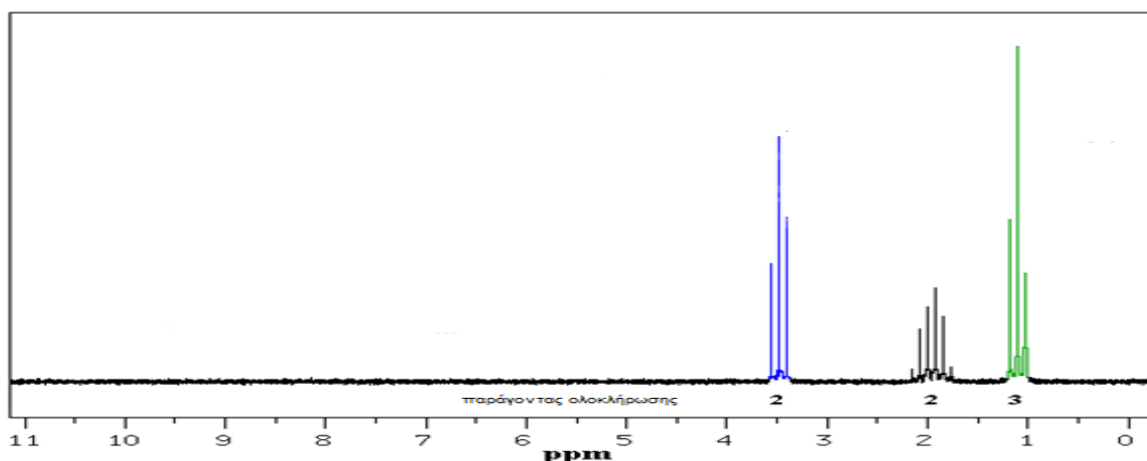


Για την ένωση Ψ δίνονται οι πιο κάτω πληροφορίες:

- Είναι άκυκλη κορεσμένη μονοσθενής αλκοόλη.
- Περιέχει 26,66% κ.μ. οξυγόνο.
- Μπορεί να παρασκευαστεί με αλκαλική υδρόλυση του βρωμοαλκανίου Θ στις κατάλληλες συνθήκες.

Για την οργανική ένωση Θ δίνεται το φάσμα 1H NMR υψηλής ανάλυσης .

Φάσμα 1H NMR της ένωσης Θ



Για την οργανική ένωση Φ δίνονται οι πιο κάτω πληροφορίες:

- i. Έχει μοριακό τύπο $C_4H_8O_3$.
- ii. Αντιδρά με PCl_5 στις κατάλληλες συνθήκες σε αναλογία mole 1:2.
- iii. Αντιδρά με στερεό Na_2CO_3 και παρατηρείται αφρισμός.
- iv. Οξειδώνεται με θερμό διάλυμα $K_2Cr_2O_7/H_2SO_4$ σχηματίζοντας προϊόν, το οποίο δίνει εμφανές αποτέλεσμα με τη 2,4 δινιτροφαιλυδραζίνη, αλλά δεν αντιδρά με το αντιδραστήριο Tollens.
- v. Αντιδρά με διάλυμα $I_2/NaOH$ και δίνει κίτρινο ίζημα.

α) Να γράψετε τον μοριακό τύπο της οργανικής ένωσης Ψ καταγράφοντας τους υπολογισμούς σας.

β) i. Να γράψετε τον συντακτικό τύπο της ένωσης Θ, αξιοποιώντας και καταγράφοντας όλες τις πληροφορίες που δίνει το φάσμα 1H NMR της.
ii. Να ονομάσετε τον μηχανισμό που ακολουθείται κατά την υδρόλυση της ένωσης Θ.

iii. Να καταγράψετε τον μηχανισμό για την αντίδραση σχηματισμού του προϊόντος Ψ, που προκύπτει από την αλκαλική υδρόλυση της οργανικής ένωσης Θ, χρησιμοποιώντας τους κατάλληλους συντακτικούς τύπους και συμβολισμούς.

γ) Να γράψετε τους συντακτικούς τύπους των ενώσεων Χ και Φ αξιοποιώντας όλα τα δεδομένα και καταγράφοντας όλους τους συλλογισμούς σας.

δ) Να καταγράψετε για το φάσμα 1H NMR υψηλής ανάλυσης της ένωσης Φ τι αναμένεται όσον αφορά στα πιο κάτω:

- i. τον αριθμό των κορυφών
- ii. την πολλαπλότητα της κάθε κορυφής
- iii. τον παράγοντα ολοκλήρωσης.

Ερώτηση 2- Προτεινόμενη Λύση

α) Ένωση Ψ είναι άκυκλη κορεσμένη μονοσθενής αλκοόλη → ΓΜΤ $C_nH_{2n+2}O$

$(14n + 18) \text{ g}$ 16 g O

100 g $26,66 \text{ g}$ → $n = 3$ → ΜΤ Ψ : C_3H_7OH

β) i. → ΜΤ Θ : C_3H_7Br

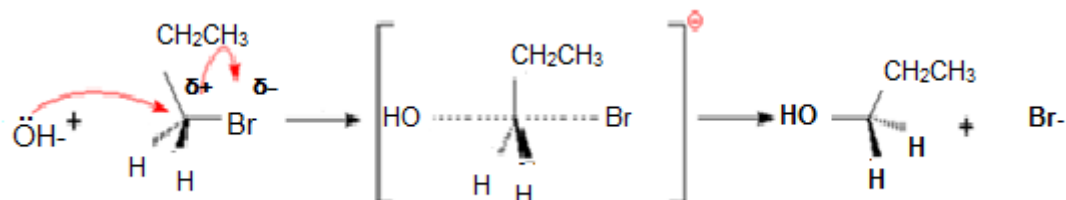
Από το φάσμα 1H NMR της ένωσης Θ :

δ (ppm)	Πολλαπλότητα	Π.Ο	Χαρακτηριστικό δομής
1,0	3	3	3 ισοδύναμα H με 2 H σε γειτονικό C
2,0	6	2	2 ισοδύναμα H με 5H σε γειτονικό C
3,5	3	2	2 ισοδύναμα H με 2 H σε γειτονικό C

→ ΣΤ Θ: $CH_3CH_2CH_2Br$

ii. πυρηνόφιλη υποκατάσταση S_N2

iii.



γ) Φάσμα IR της X:

Κορυφή $3200-3600 \text{ cm}^{-1}$, έκτασης, ισχυρή, ευρεία → O-H στις αλκοόλες

Κορυφή $1735-1750 \text{ cm}^{-1}$, έκτασης, ισχυρή → C=O στους εστέρες

Κορυφή $1300-1000 \text{ cm}^{-1}$, έκτασης, δύο κορυφές ή περισσότερες → C-O στους εστέρες

Μοριακός τύπος της X, $C_7H_{14}O_3$, 3 O → συνάδει με μία εστεροομάδα και μία υδροξυλομάδα στο μόριο της X.

Η ένωση X υδρολύεται αλκαλικά οπότε παράγεται η ένωση Ψ (αλκοόλη) και η Z η οποία είναι άλας νατρίου με μία υδροξυλοομάδα στο μόριό της.

Η ένωση X έχει 7 άτομα C στο μόριό της και η Ψ έχει 3 άτομα C → η Z έχει $7-3=4$ άτομα C στο μόριό της

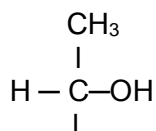
Η ένωση Φ προέρχεται από την Ζ με επίδραση οξέος → η ένωση Φ αναμένεται να έχει καρβοξυλομάδα και υδροξυλομάδα στο μόριό της.

Αυτό επιβεβαιώνεται από τις πιο κάτω πληροφορίες που δίνονται για την Φ:

- Αντιδρά με PCl_5 στις κατάλληλες συνθήκες σε αναλογία moles 1:2.
→ Έχει δύο $-\text{OH}$ στο μόριό της
- Αντιδρά με στερεό Na_2CO_3 και παρατηρείται αφρισμός.
→ Έχει $-\text{COOH}$ στο μόριό της

Επιπλέον

- Οξειδώνεται με θερμό διάλυμα $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7 / \text{H}_2\text{SO}_4$ σχηματίζοντας προϊόν, το οποίο δίνει εμφανές αποτέλεσμα με τη 2,4-δινιτροφαινυλϋδραζίνη, → το προϊόν περιέχει καρβονυλομάδα, $\text{C}=\text{O}$
αλλά δεν αντιδρά με το αντιδραστήριο Tollens → έχει αλδευδομάδα
→ η ένωση Φ είναι 2^ο ταγής αλκοόλη.
- Αντιδρά με διάλυμα I_2/NaOH και δίνει κίτρινο ίζημα → Η ένωση Φ είναι μεθυλο 2^ο ταγής αλκοόλη. Έχει το πιο κάτω δομικό στοιχείο στο μόριό της.



Επομένως ο ΣΤ της Φ: $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{COOH}$

και ο ΣΤ της Χ: $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{COOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

δ) i. 7 κορυφές των πρωτονίων

ii.	$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{COOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$						
κορυφή:	α	β	γ	δ	ε	ζ	η
πολλαπλότητα:	2	6	1	2	3	6	3
Π.Ο. :	3	1	1	2	2	2	3