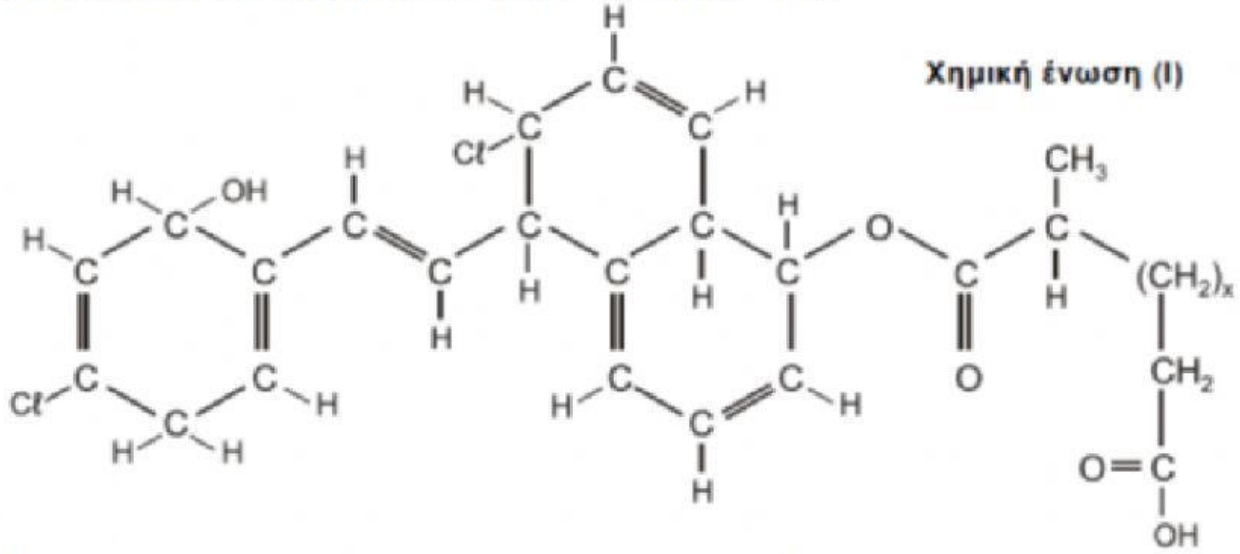
1. Μία από τις ενώσεις που εξετάζονται ως πιθανή δραστική ουσία φαρμάκου είναι η χημική ένωση (Ι), με μοριακό τύπο $C_{23+x}H_{24+2x}Cl_2O_5$:



Δ1. Για την εύρεση της σχετικής μοριακής μάζας της χημικής ένωσης (Ι), χρησιμοποιήθηκε η τεχνική της ωσμωμετρίας. Αν 50mL διαλύματος της χημικής ένωσης (Ι) στο οποίο έχουν διαλυθεί 0,1g αυτής εμφανίζει ωσμωτική πίεση 0,1atm στους 27°C, να βρείτε τον αριθμό x στον μοριακό τύπο.

Δίνονται:

- $R = 0{,}082\ atm \cdot L \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$.
- A_r: H=1, C=12, O=16, Cl=35 (στη χημική ένωση (Ι) έχει χρησιμοποιηθεί αποκλειστικά το ισότοπο ^{35}Cl).

$$\Pi \cdot V = n \cdot R \cdot T \text{ ή } \Pi \cdot V = \frac{m}{Mr} \cdot R \cdot T \Rightarrow Mr = \frac{m \cdot R \cdot T}{\Pi \cdot V} \Rightarrow Mr = 492$$

Σ Λ

$$Mr = (23 + x) \cdot 12 + (24 + 2x) \cdot 1 + 2 \cdot 35 + 5 \cdot 16 \Leftrightarrow$$

$$492 = 276 + 12x + 24 + 2x + 70 + 80 \Leftrightarrow \mathbf{x = 3}$$

Σ Λ

Δ2. Η χημική ένωση (Ι) περιέχει μια καρβοξυλομάδα και ως εκ τούτου θεωρείται ως ασθενές οξύ του τύπου HA. Αν διάλυμα του μετά νατρίου άλατος της χημικής ένωσης (Ι), NaA, συγκέντρωσης 10^{-2} M έχει pH = 8, να δείξετε ότι η pka της χημικής ένωσης (Ι) είναι 4.

(M)	NaA	→	Na^+	+	A^-
αρχ.	10^{-2}		-		-
τελ.	-		10^{-2}		10^{-2}

Σ Λ

αφού HA ασθενές οξύ τότε:

(M)	A^-	+	H_2O	↔	HA	+	OH^-
αρχ.	10^{-2}				-		-
ιον/παρ	-x				x		x
τελ.	10^{-2} -x				x		x

Σ Λ

LIVEWORKSHEETS

αφού pH = 8, τότε $[H_3O^+] = 10^{-8}M$,

άρα $[OH^-] = \frac{10^{-14}}{10^{-8}} = 10^{-6} = x$ Σ Λ

$Kb_{A^-} = \frac{x^2}{10^{-2} - x} = 10^{-10}$

άρα $Ka_{HA} = \frac{10^{-14}}{10^{-10}} = 10^{-4} \Rightarrow$ **pKa = 4**

Σ Λ

Δ3. α. Πόσα από τα άτομα υδρογόνου της χημικής ένωσης (Ι) μπορούν να συμμετάσχουν στη δημιουργία δεσμών υδρογόνου

Για να συμμετέχει ένα άτομο Η σε δεσμό Υδρογόνου θα πρέπει να είναι απευθείας ενωμένο με F,O,N

Σ Λ

Μπορούν να συμμετάσχουν 2 άτομα Η (του ΟΗ).

β. Πόσα από τα άτομα της χημικής ένωσης (Ι) (εκτός των ατόμων υδρογόνου) μπορούν να συμμετάσχουν στη δημιουργία δεσμών υδρογόνου

Σε δεσμό υδρογόνου μπορούν να συμμετάσχουν τα 5 οξυγόνα.

Σ Λ

Δ4. Σε ένα σύστημα οκτανόλης/νερού, όπως αυτό του Σχήματος Δ4, αποτελούμενο από 900mL οκτανόλης και 100mL νερού, διαλύονται 0,091mol της χημικής ένωσης (Ι) χωρίς μεταβολή του όγκου.

Μετά από την απαραίτητη διαδικασία ανάδευσης το σύστημα ηρεμεί και οι διαλύτες διαχωρίζονται σε δύο φάσεις, όπως το Σχήμα Δ4. Το pH στην υδατική φάση μετρήθηκε ίσο με 3. Να βρεθεί η τιμή του λόγου $\log\frac{[\text{χημική ένωση (I)}]_{\text{οκτ}}}{[\text{χημική ένωση (I)}]_{\text{νερ}}}$

Σχήμα Δ4

Αφού στην υδατική φάση pH = 3, τότε $[H_3O^+] = 10^{-3}M$

Σ Λ

(M)	HA	+ H_2O ↔	A^-	+ H_3O^+
αρχ.	C		-	-
ιον/παρ	-y		y	y
τελ.	C-y		y	y =10^{-3}

Σ Λ

LIVEWORKSHEETS

$Ka_{HA} = \frac{y^2}{C - y} = 10^{-4}$, άρα $C = 10^{-2}M$ Σ Λ

δηλ. [χημική ένωση(I)]$_{νερ}$ = $10^{-2}M$ Σ Λ

$n = C \cdot V = 10^{-2} \cdot 0,1 = 10^{-3}$ mol διαλύονται στο νερό
έτσι στην αλκοόλη διαλύονται : 0,091 - 0,001 = 0,09mol

Σ Λ

όπου [χημική ένωση(I)]$_{οκτ}$ = $\frac{0,09}{0,9}$ = 0,1M Σ Λ

$$\ell og \frac{[\text{χημική ένωση I}]_{οκτ}}{[\text{χημική ένωση I}]_{νερ}} = \ell og \frac{0,1}{0.01} = \ell og 10 = 1$$

Σ Λ

Δ5. Η πληθώρα των ενώσεων που δυνητικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως δραστικές ουσίες φαρμάκων έχει επιφέρει την ανάγκη θέσπισης κριτηρίων επιλογής, όπως τα παρακάτω:

1. Η σχετική μοριακή μάζα της ένωσης δεν πρέπει να υπερβαίνει το 500.
2. Ο αριθμός των ατόμων υδρογόνου που μπορεί να συμμετάσχουν στη δημιουργία δεσμών υδρογόνου να μην υπερβαίνει το 5.
3. Ο αριθμός των ατόμων που κάνουν δεσμούς υδρογόνου να με άτομα υδρογόνου να μην υπερβαίνει το 10.
4. Όταν η υπό εξέταση ένωση διαλύεται σε ένα διφασικό σύστημα οκτανόλης/νερού (2 διαλύτες που ΔΕΝ αναμιγνύονται, ο λόγος $\log \frac{[\text{φάρμακο}]_{οκτ}}{[\text{φάρμακο}]_{νερ}}$ να μην υπερβαίνει το 5.

   Όπου [φάρμακο]$_{οκτ}$, [φάρμακο]$_{νερ}$ είναι οι συγκεντρώσεις της μη ιοντισμένης μορφής του φαρμάκου στην οκτανόλη και στο νερό, αντίστοιχα.

Να εξηγήσετε αν η χημική ένωση (I) είναι συμβατή με τα 4 παραπάνω κριτήρια;
Δίνεται ότι:

- $K_w = 10^{-14}$.
- Τα δεδομένα του θέματος Δ επιτρέπουν τις γνωστές προσεγγίσεις.

. Η χημική ένωση (I) είναι συμβατή με τα 4 κριτήρια.

1. Mr = 492 < 500
2. Άτομα H : 2 < 5
3. Άτομα O: 5 < 10
4. $\ell og \frac{[\text{φάρμακο}]_{οκτ}}{[\text{φάρμακο}]_{νερ}} = 1 < 5$ Σ Λ

LIVEWORKSHEETS