

KEMIOLYMPIADEN 2025, OMGÅNG 2

Lärarmanual

Denna fil innehåller rättningsmall och fullständiga lösningar till uppgifterna.



Poängsättning vid rättning

Du ska endast poängsätta svaren på svarsblanketten. Använd den medföljande rättningsmallen för din bedömning. Du ska på varje deluppgift, eller del av deluppgift, antingen sätta full poäng eller noll poäng. Sätt i tveksamma fall full poäng. **OBS! I uppgift 7b och 7e ska dock elevens motivering på svarsblanketten bedömas och dessa deluppgifter poängsätts enligt rättningsmallen.**

Ange dina poäng i kolumnen "L". Ange totalsumman längst nere på sidan 3. Du ska inte skriva något i den skuggade kolumnen.

Observera att du vid rättningen av elevers svarsblankett inte ska beakta de fullständiga lösningarna. (*De lösningar som ges i "Fullständiga lösningar" saknar delpoäng*).

Inrapportering

Resultaten ska rapporteras in både digitalt och via ordinarie postgång **senast måndag 24 februari**.

Skicka en PDF-fil för varje enskilt elevresultat. (*För att kunna rapportera in resultaten digitalt behöver du som lärare ha ett Google-konto. Du kan skapa ett konto gratis om du inte redan har ett*).

1. Skanna in den **rättade svarsblanketten** och **elevens fullständiga lösningar som en PDF-fil**. Namnge filen med *elevens namn - skolans namn*. En PDF-fil för varje elev! Skanna och rapportera in de sex bästa resultaten, oavsett poäng samt alla elever med **20 poäng eller mer**.
2. PDF-filerna skickas in via följande Google-formulär <https://forms.gle/B5LBAzmANAJmFpnx8> (*Här behövs ett Google-konto för att kunna fylla i formuläret*).

I formuläret anger du skolans uppgifter, namn och poäng på alla elever som har 20 poäng eller mer. För att få en rättvis lagtävling rapporterar läraren alltid in de sex bästa resultaten, även för de elever som fått mindre än **20 poäng**.

Du inte behöver skriva in eleverna i en viss ordning i formuläret. Om du behöver rapportera in resultat från fler än 30 elever, går det bra att fylla i formuläret en gång till.

3. **Observera:** Elevernas **rättade svarsblanketter** och **lösningar ska också** skickas med reguljär post **senast måndag 24 februari, 2024** till:
Cecilia Stenberg, Renstiernas gata 22, 11631 Stockholm

Bearbetning av inskickade resultat

Kemiolympiadnämnden kommer utgå från lärarens rättning. Alla prov med en totalsumma över ett visst poängantal kommer att rättas om och poängsättas utifrån de fullständiga lösningarna.

De cirka 10 elever som efter omrättning erhåller högst poäng erbjuds en plats i finalomgången. Antalet prov som rättas om beror på hur poängbilden ser ut och för en korrekt sammanställning i lagtävlingen för Wallenbergs kemipris.

Kemiolympiadnämnden gör urvalet för fullständig omrättning enbart på grundval av inrapporterade poängsummor.

Efter omrättning publiceras en resultatlista på hemsidan <https://kemisamfundet.se/kemi-i-skolan/kemiolympiaden/> De elever och skolor som tilldelas Wallenbergs kemipris kommer kontaktas via telefon eller mejl under mars månad. Pris utbetalas senare.

KEMIOLYMPIADEN 2025, OMGÅNG 2

Rättningsmall



Uppg.	Endast svar på denna blankett. Inga uträkningar. Ringa in rätt svar på flervalsfrågorna. Deluppgifter med index ^{RE} ska <u>även</u> redovisas fullständigt på särskilt papper.	Poäng	L	
1	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv) (v)	2		
2	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv) (v)	2		
3	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv) (v)	2		
4	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv) (v)	2		
5a	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv) (v)	2		
5b	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv) (v)	2		
6a	Reaktionsformel: $\text{Na}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{NaOH}$	1		
6b	Reaktionsformel: $2 \text{Na} + 2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{NaOH} + \text{H}_2$	1		
6c ^{RE}	$n(\text{H}_2) = $ $9,85 \cdot 10^{-3}$ mol	2		
6d	Reaktionsformel: $\text{NaOH} + \text{HCl} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{NaCl}$	1		
6e ^{RE}	$n(\text{NaOH}) = $ $2,038 \cdot 10^{-2}$ mol	2		
6f ^{RE}	$n(\text{Na}) = $ $1,97 \cdot 10^{-2}$ mol ; $n(\text{Na}_2\text{O}) = $ $3,4 \cdot 10^{-4}$ mol	3		
6g ^{RE}	Masshalt Na: 90,6 % Masshalt Na ₂ O: 4,2 % Masshalt NaCl: 5,2 %	2		

7a	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv) (v)	2		
7b ^{RE}	Motivering: Valin är betydligt större än alanin. Eftersom den muterade aminosyran är inuti enzymet leder detta till att enzymet ändrar form ("buktar ut"), vilket i sin tur leder till att enzymet förlorar sin funktion. Glycin är betydligt mindre än isoleucin, vilket kompenserar för storleksökningen från valin, och därmed återställer aktiviteten. +1p – Eleven för ett godtagbart resonemang om att enzymets aktivitet påverkas av dess struktur. +1p – Eleven utgår ifrån aminosyrornas storlek för att förklara hur enzymets struktur förändras vid båda mutationerna, och hur det påverkar enzymets aktivitet.	2		
7c ^{RE}	$v_{\max} = 27 \mu\text{mol/min}$; $K_M = 0,45 \text{ mM}$	4		
7d ^{RE}	$v = 30 \mu\text{mol/min}$	2		
7e ^{RE}	Affiniteten är: ___högre <u>X</u>lägre ___oberoende av K_M Motivering: Vi vet att $K_M = \frac{v_{\max}}{2}$. Med andra ord, K_M är den substratkonzentration vid vilken reaktionshastigheten är hälften av $v_{\max}$. Ju större enzymets affinitet för substratet är, desto högre blir reaktionshastigheten. Ett högre värde på K_M innebär att det krävs större substratkonzentration för att nå upp till halva reaktionshastigheten. Det måste därför innebära att ett högre värde på K_M innebär att enzymets affinitet för substratet är lägre. <u>Bedömning</u> 1p – Eleven för ett godtagbart resonemang som utgår ifrån <u>en</u> av punkterna nedan. K_M är substratkonzentrationen vid vilken reaktionshastigheten är hälften av $v_{\max}$. - Högre affinitet medför högre reaktionshastighet. +1p – Eleven för ett gott resonemang som utgår ifrån <u>båda</u> punkterna ovan. +1p – Eleven för ett mycket gott resonemang som utgår ifrån <u>båda</u> punkterna ovan, samt drar slutsatsen att ett högre värde på K_M innebär att enzymets affinitet för substratet är lägre.	3		

8a	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv) (v) (vi)	2		
8b ^{RE}	$n(\text{H}_2) = 1 \cdot 10^6$ mol	4		
8c ^{RE}	Antal tankar: 5 stycken	2		
9a	Lägst pH <u>C</u> <u>A</u> <u>D</u> <u>B</u> Högst pH	2		
9b	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii)	1		
9c	Ringa in rätt svar: (i) (ii) (iii) (iv)	1		
9d ^{RE}	Masshalt = 917 ppm	3		
9e	Cyanidin: <u>B</u> Delfinidin: <u>C</u> Pelargonidin: <u>A</u> Petunidin: <u>D</u>	3		
	TOTALPOÄNG	55		

KEMIOLYMPIADEN 2024, OMGÅNG 2

Fullständiga lösningar och några kommentarer



Uppgift 1

$$n(\text{VO}^{2+}) = 0,0010 \text{ mol}$$

1 mol VO^{2+} motsvarar $1/5$ mol MnO_4^-

$$n(\text{MnO}_4^-) = (0,0010/5) \text{ mol} = 0,00020 \text{ mol}$$

$$V(\text{MnO}_4^-) = (0,00020/0,010) \text{ dm}^3 = 0,020 \text{ dm}^3$$

Uppgift 2

Jonen ($\text{UO}_2(\text{CO}_3)_2^{2-}$) har en nettoladdning på -2. Varje karbonatjon har en laddning på -2 och har därmed oxidationstalet -II. Varje syre har oxidationstalet -II. Uran måste därmed ha oxidationstalet +VI.

Uppgift 3

Natriumjonen har laddningen +1 och protolyseras inte. Den påverkar därmed inte pH.

H_2SO_4 är en stark syra i sitt första protolyssteg och en svag syra med $\text{pK}_a = 2,0$ i sitt andra protolyssteg. Lösningen blir därför starkt sur.

HSO_4^- är en svag syra med $\text{pK}_a = 1,9$. Dess basiska egenskaper är försumbara då den är korresponderande bas till den starka syran svavelsyra. En lösning av NaHSO_4 blir därför sur.

SO_4^{2-} är korresponderande bas till HSO_4^- , men med en mycket liten baskonstant, ($\text{pK}_b = 14,0 - 2,0 = 12,0$). En lösning av Na_2SO_4 blir därför nära neutral

HCO_3^- är en amfolyt med både sura och basiska egenskaper, $\text{pK}_a = 10,3$ och $\text{pK}_b = 7,6$. Då $\text{pK}_b < \text{pK}_a$ blir en lösning av NaHCO_3 basisk.

CO_3^{2-} är en bas med $\text{pK}_b = 3,7$ och lösningen blir basisk. Då dess pK_b är lägre än för HCO_3^- har lösningen av Na_2CO_3 ett högre pH än lösningen av NaHCO_3 .

Uppgift 4

Alla protoner i $\text{C}(\text{CH}_3)_4$ är ekvivalenta (har samma omgivning) och ger därför bara en signal i ^1H -NMR.

Uppgift 5

Elektronerna runt en atom kan delas in i olika skal (huvudnivåer). Det 1:a skalet (det innersta) kallas K-skalet, 2:a skalet L-skalet och 3:e skalet M-skalet. etc. Inom ett skal (en huvudnivå) kan elektronerna delas in i undergrupper med olika symmetri på sannolikhetsmolnet. S-elektroner ingår i en undergrupp (en s-orbital) som har sfärisk symmetri medan p- och d-elektroner ingår i undergrupper (p- och d-orbitaler) som har olika icke-sfäriska symmetrier. I K-skalet kan det endast finnas s-elektroner, i L-skalet endast s- och p-elektroner och i M-skalet s-, p-, och d-elektroner. I varje orbital ryms högst 2 elektroner och på varje huvudnivå finns högst en s-orbital (två s-elektroner), tre p-orbitaler (sex p-elektroner), och fem d-orbitaler (tio d-elektroner).

Exempel: Natrium, som har 11 elektroner, har elektronkonfigurationen $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$. Detta utläses att det finns två s-elektroner i 1:a skalet, två s-elektroner och sex p-elektroner i 2:a skalet samt en s-elektron i 3:e skalet.

Ibland använder man ett förkortat skrivsätt där konfigurationen för närmast föregående ädelgas ersätts med ädelgasens kemiska beteckning inom hakparenteser.

Exempel: Elektronkonfigurationen för natrium i exemplet ovan kan då förkortat skrivas: $[\text{Ne}]3s^1$, där $[\text{Ne}]$ är elektronkonfigurationen för neon: $1s^2 2s^2 2p^6$.

- a) Denna uppgift kan lösas genom att enbart räkna antalet elektroner i de olika alternativen. Silver har atomnummer 47 och ska därmed ha 47 elektroner. Endast elektronkonfigurationen i alternativ (iv) har 47 elektroner: 36 elektroner i krypton + ytterligare 11 elektroner
- b) Koppar har atomnummer 29. Kopparjonen har då 27 elektroner. Även här är det enbart ett alternativ som har rätt antal elektroner nämligen alternativ (iii).

Uppgift 6

- a) $\text{Na}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{NaOH}$
- b) $2 \text{Na} + 2 \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{NaOH} + \text{H}_2$
- c) $p \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad n(\text{H}_2) = \frac{pV}{RT} = \frac{101,3 \cdot 10^3 \cdot 220,6 \cdot 10^{-6}}{8,31 \cdot 273} \text{ mol} = 9,85 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$
- d) $\text{NaOH} + \text{HCl} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{NaCl}$
- e) Förbrukad mängd HCl vid titrering av delprov (25 cm^3 av 250 cm^3 utspädd lösning):
 $n(\text{HCl}) = (0,112 \cdot 18,2 \cdot 10^{-3}) \text{ mol} = 2,038 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$
1 mol NaOH motsvarar 1 mol HCl

$$n(\text{NaOH})_{\text{delprov}} = 2,038 \cdot 10^{-3} \text{ mol}$$

$$n(\text{NaOH})_{\text{totalt}} = (10 \cdot 2,038 \cdot 10^{-3}) \text{ mol} = 2,038 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

- f) 1 mol H_2 motsvarar 2 mol Na
1 mol H_2 motsvarar 2 mol NaOH

$$n(\text{H}_2) = 9,85 \cdot 10^{-3} \text{ mol vätgas}$$

$$n(\text{Na}) = 2 \cdot n(\text{H}_2) = 2 \cdot 9,85 \cdot 10^{-3} \text{ mol} = \mathbf{1,97 \cdot 10^{-2} \text{ mol}}$$

Mängden bildad NaOH, (n_1), från upplösningen av natrium:

$$n_1(\text{NaOH}) = n(\text{Na}) = 1,97 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

Mängden bildad NaOH, (n_2), från upplösning av natriumoxid:

$$n_2(\text{NaOH}) = n(\text{NaOH})_{\text{totalt}} - n_1(\text{NaOH}) = (2,038 \cdot 10^{-2} - 1,97 \cdot 10^{-2}) \text{ mol} = 6,8 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

1 mol NaOH motsvarar $\frac{1}{2}$ mol Na_2O

$$n(\text{Na}_2\text{O}) = \frac{1}{2} \cdot 6,8 \cdot 10^{-4} \text{ mol} = \mathbf{3,4 \cdot 10^{-4} \text{ mol}}$$

- g) $M(\text{Na}) = 23,0 \text{ g/mol}, \quad n(\text{Na}) = 1,97 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$

$$m(\text{Na}) = n \cdot M = (1,97 \cdot 10^{-2} \cdot 23,0) \text{ g} = 0,453 \text{ g}$$

$$\mathbf{\text{Masshalten av Na: } m(\text{Na})/m(\text{prov}) = (0,453/0,500) = 0,906 = \mathbf{90,6 \% Na}}$$

$$M(\text{Na}_2\text{O}) = 62,0 \text{ g/mol}, n(\text{Na}_2\text{O}) = 3,4 \cdot 10^{-4} \text{ mol}$$

$$m(\text{Na}_2\text{O}) = n \cdot M = (3,4 \cdot 10^{-4} \cdot 62,0) = 0,0211 \text{ g}$$

$$\text{Masshalten av Na}_2\text{O: } m(\text{Na}_2\text{O})/m(\text{prov}) = 0,0211/0,500 = 0,042 = \mathbf{4,2 \% Na_2O}$$

$$\text{Masshalten av NaCl: } (100 - 90,6 - 4,2) \% = \mathbf{5,2 \% NaCl}$$

Uppgift 7

- a) ii
- b) Valin är betydligt större än alanin. Eftersom den muterade aminosyran är inuti enzymet leder detta till att enzymet ändrar form ("buktar ut"), vilket i sin tur leder till att enzymet förlorar sin funktion. Glycin är betydligt mindre än isoleucin, vilket kompenserar för storleksökningen från valin, och därmed återställer aktiviteten.

Bedömning:

+1p – Eleven för ett godtagbart resonemang om att enzymets aktivitet påverkas av dess struktur.

+1p – Eleven utgår ifrån aminosyrornas storlek för att förklara hur enzymets struktur förändras vid båda mutationerna, och hur det påverkar enzymets aktivitet.

- c) Skärningen på y-axeln är vid $\frac{1}{v_{\max}}$. Den rätta trendlinjens ekvation ger oss att:

$$v_{\max} = \frac{1}{0,0366(\mu\text{mol}/\text{min})^{-1}} = 27,3224044 \mu\text{mol}/\text{min} \approx 27 \mu\text{mol}/\text{min}.$$

Den rätta trendlinjens lutning är $\frac{K_M}{v_{\max}}$. Information från diagrammet ger oss att:

$$\frac{K_M}{v_{\max}} = 0,0165$$

$$K_M = 0,0165 \cdot v_{\max} = 0,165 \cdot 27,3224044 = 0,45081967 \text{ mM} \approx 0,45 \text{ mM}$$

Bedömning

Varje svar med korrekt beräkning ger 2p. Ingen hänsyn tas till antal värdesiffror eller enhet i det här skedet.

- d) Michaelis-Mentens ekvation ger oss följande:

$$v = \frac{v_{\max}[\text{S}]}{K_M + [\text{S}]} = \frac{50 \mu\text{mol}/\text{min} \cdot 0,60 \text{ mM}}{0,40 \text{ mM} + 0,60 \text{ mM}} = 30 \mu\text{mol}/\text{min}$$

Bedömning: Korrekt svar med korrekt enhet ger 2p.

- e) Vi vet att $K_M = \frac{v_{\max}}{2}$. Med andra ord, K_M är den substratkonzentration vid vilken reaktionshastigheten är hälften av $v_{\max}$. Ju större enzymets affinitet för substratet är, desto högre blir reaktionshastigheten. Ett högre värde på K_M innebär att det krävs större substratkonzentration för att nå upp till halva reaktionshastigheten. Det måste därför innebära att ett högre värde på K_M innebär att enzymets affinitet för substratet är lägre.

Bedömning

1p – Eleven för ett godtagbart resonemang som utgår ifrån en av punkterna nedan.

- K_M är substratkonzentrationen vid vilken reaktionshastigheten är hälften av $v_{\max}$.
- Högre affinitet medför högre reaktionshastighet.

+1p – Eleven för ett gott resonemang som utgår ifrån båda punkterna ovan.

+1p – Eleven för ett mycket gott resonemang som utgår ifrån båda punkterna ovan, samt drar slutsatsen att ett högre värde på K_M innebär att enzymets affinitet för substratet är lägre.

Uppgift 8

- a) Eftersom ångreformeringsreaktionen är endoterm så kommer jämviktskonstanten öka om temperaturen ökar (enligt Le Chateliers princip). Därmed kommer jämviktsläget förskjutas åt produktshållet.

Antalet gaspartiklar på reaktantsidan är två mol medan den är fyra mol på produktsidan. Därmed kommer en tryckminskning att förskjuta jämviktsläget åt produkthållet enligt Le Chateliers princip.

En ökning av koncentrationen av vätgas förskjuter däremot jämviktsläget åt reaktanthållet enligt Le Chateliers princip så det är inte ett korrekt alternativ.

Tillsats av en mer effektiv katalysator påverkar inte själva jämviktsläget utan endast hur snabbt jämviktsläget nås. I ångreformeringsreaktionen används redan en nickelskatalysator.

- b) Solinstrålningen är 1000 W/m^2 , och fältets yta är $200 \text{ m} \times 300 \text{ m}$. Den totala effekten P som träffar solcellerna är:

$$P = 1000 \frac{\text{W}}{\text{m}^2} \cdot 200 \text{ m} \cdot 300 \text{ m} = 6 \cdot 10^7 \text{ W}$$

Med en verkningsgrad på 20 % genererar solcellerna:

$$6 \cdot 10^7 \text{ W} \cdot 0,20 = 1,2 \cdot 10^7 \text{ W}$$

Under 8 timmar genereras energi:

$$1,2 \cdot 10^7 \text{ W} \cdot 8 \text{ h} \cdot 3600 \frac{\text{s}}{\text{h}} = 3,456 \cdot 10^{11} \text{ J}$$

Elektrolysörens verkningsgrad är 75 %. Den användbara energin för att producera vätgas blir då:

$$3,456 \cdot 10^{11} \text{ J} \cdot 0,75 = 2,592 \cdot 10^{11} \text{ J}$$

Den mängd elektroner som förflyttas är då:

$$n(e^-) = \frac{2,592 \cdot 10^{11} \text{ J}}{1,23 \text{ V} \cdot 96485,3365 \text{ C/mol}} = 2,184080 \dots \cdot 10^6 \text{ mol}$$

där $96\,485,3365 \text{ C/mol}$ är Faradays konstant som anger hur många laddningar i SI-enheten Coulomb som motsvarar en mol elementarladdningar.

För varje vätgasmolekyl som bildas behöver två elektroner förflyttas, därmed är substansmängden vätgas:

$$n(\text{H}_2) = \frac{2,184080 \dots \cdot 10^6 \text{ mol}}{2} = 1,092040 \dots \cdot 10^6 \text{ mol} \approx 1 \cdot 10^6 \text{ mol}$$

- c) Den allmänna gaslagen ger:

$$V_{\text{vätgas}} = \frac{nRT}{p} = \frac{n(\text{H}_2) \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{mol}} \cdot 298 \text{ K}}{600 \cdot 10^5 \text{ Pa}} = 45,09346417 \dots \text{ m}^3 \approx 45 \text{ m}^3$$

$$V_{\text{tank}} = 10000 \text{ dm}^3 = 10 \text{ m}^3$$

$$\frac{45 \text{ m}^3}{10 \text{ m}^3} = 4,5$$

Svar: vi behöver fem 10 000 L-tankar för att rymma all vätgas som produceras en genomsnittlig solig dag.

Uppgift 9

- a) Ju lägre pH desto mer protonerad blir antocyanidinen. Eftersom protoner är positivt laddade kommer mer protonerade ämnen att ha en högre laddning.

Från lägst till högst pH (högst till lägst laddning):

$C < A < D < B$

- b) Eftersom lösningen är kraftigt buffrad kommer lösningens pH inte att påverkas av tillsatsen av järnjonerna.

Om den mindre protonerade strukturen stabiliseras kommer jämvikten förskjutas mot den mindre protonerade strukturen. Eftersom strukturen är mindre protonerad vid höga pH i lösningar utan järnjoner kommer färgen på lösningen indikera ett högre pH än det egentliga pH-värdet. Man kommer alltså att läsa av ett för högt pH-värde, i detta fall $\text{pH} > 7$.

- c) Komplex: en kemisk förening där en (eller flera) metalljoner binder kovalent till en eller flera atomer, joner eller molekyler.

Legering: en fast blandning av ämnen där minst ett av ämnena är en metall (inte joner).

Salt: en jonförening mellan två joner. En jon kan dock vara en så kallad sammansatt jon som i sig består av flera atomer men som helhet måste jonen vara laddad.

Molekyl: Ett grundämne eller en kemisk förening med kovalenta bindningar mellan atomer.

- d) $c = A/(\epsilon l) = 0,446/(21865 \cdot 1) = 2,0398 \cdot 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$
 $n = c \cdot V = 2,0398 \cdot 10^{-5} \cdot 1,00 = 2,0398 \cdot 10^{-5} \text{ mol}$
 $m(\text{krys}) = M \cdot n = 449,38 \cdot 2,0398 \cdot 10^{-5} = 0,009166 \text{ g}$
 $m\% = m(\text{krys})/m(\text{bär}) = 0,009166/10,0 = 9,166 \cdot 10^{-4}$
 $m\% \approx 917 \text{ ppm}$

- e) Notationen ovanför topparna i NMR- spektrumen innebär:
 $s(3)$ = singlett, tre väteatomer $d(1)$ = dubblett, en väteatom etc.

Alternativ 1:

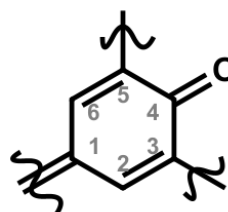
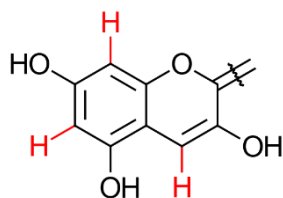
Identifiera toppen för OH-grupperna runt 4 ppm. Väten som är bundna till syreatomer tenderar att bytas ut med väten i lösningen vid NMR, vilket ger breda signaler. Utifrån integralen kan delfinidin (integral 5) och pelargonin (integral 3) identifieras. Både cyanidin och petunidin har 4 OH-grupper men endast petunidin innehåller icke-aromatiska väten i metylgruppen ($-\text{CH}_3$) som utgör singletten vid 3 ppm i D.

Alternativ 2:

Den bicycliska delen (se nedan) har 3 unika väten, och då denna del finns hos samtliga ämnen är även motsvarande signaler närvarande för samtliga. Det finns fyra signaler som är i stort sett identiska för alla fyra spektrumen: $\delta = 6,5$ (1H, s), 6,1 (1H, d), 5,7 (1H, d) och 3,4. Signalerna 6,1 och 5,7 J-kopplar med varandra genom *meta*-koppling (4J) vilket ger

upphov till dubbletterna och de visar på de två vänstra vätena i dubbelringen. "Roofing-effekten" bekräftar *J*-kopplingen. Signalen vid 3,4 saknar integral och motsvarar lösningsmedlet (D₂O) vilket lämnar signalen vid 6,5 (1H, d) för det tredje aromatiska vätet.

För de övriga signalerna är metylgruppen i petunidin lättast att identifiera då inget av de andra ämnena har icke-aromatiska väten, bortsett från OH-grupper. I A och B syns det även en dubblett vid 5,2 som motsvarar väten på position 3 och 5 i ringen (se nedan) och från integralen kan man särskilja cyanidin (endast position 3) och pelargonodin (både position 3 och 5). Väten i position 2 och 6 ger upphov till signaler vid 6,7 vilka *J*-kopplar med position 3 och 5, samt varierar multipliciteten. Notera även att för delfinidin går de två singletterna ihop då ringen blir symmetrisk kring dubbelbindningen. I petunidin får vätet i position 2 ett kraftigt sänkt skift eftersom metylgruppen gör syret i etergruppen mindre elektrondragande än en hydroxylgrupp.



Bicycliska delen hos samtliga antocyanidiner. Angivna positioner i övre högra ringen hos samtliga antocyanidiner.