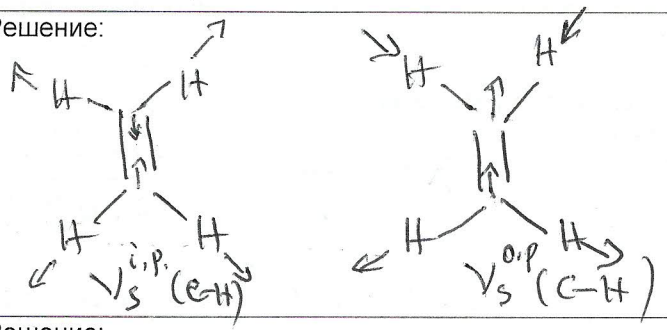
КОЛОКВИУМ
по
Инструментални методи за анализ
(вибрационна спектроскопия)

Иван Петров Стоянов					1234567890
име, презиме, фамилия					Фак. No
КХ, III курс	2	27-11-2014	32		
специалност, курс	ВАРИАНТ	ДАТА	Точки общо	Точки	Оценка

Задача 1. (4 т.) За изчисленията използвайте стойността на скоростта на светлината във вакум, c = 3.0×10^8 m/s.

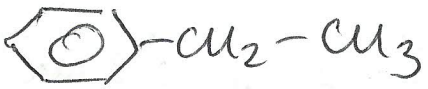
1.1. Изчислете дължината на вълната в μm на лъчение с честота 2.0×10^{14} Hz. (1 т.)	Решение: $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3.0 \times 10^8\ m.s^{-1}}{2.0 \times 10^{14}\ Hz} = 1.5 \times 10^{8-14}\ m =$ $= 1.5 \times 10^{-6} \times 10^{6}\ \mu m = 1.5 \times 10^{6-6}\ \mu m =$ $= 1.5 \times 10^{0}\ \mu m = 1.5\ \mu m$
1.2. Изчислете честота в Hz на лъчение с дължината на вълната 20 μm. (1 т.)	Решение: $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3.0 \times 10^8\ m.s^{-1}}{20\ \mu m} = \frac{3.0 \times 10^8\ m.s^{-1}}{2 \times 10^{1} \times 10^{-6}\ m} =$ $= 1.5 \times 10^{8-1-(-6)}\ s^{-1} = 1.5 \times 10^{13}\ Hz$
1.3. Изчислете вълновото число в cm^{-1} на ИЧ лъчение с дължина на вълната λ = 2 μm. (1 т.)	Решение: $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\ \mu m} = \frac{0.5}{10^{-6}\ m} = \frac{0.5 \times 10^{+6}}{10^2\ cm} =$ $= 0.5 \times 10^{+6-2}\ cm^{-1} = 0.5 \times 10^4 = 5 \times 10^3\ cm^{-1} = 5000\ cm^{-1}$
1.4. Изчислете дължината на вълната в μm на ИЧ лъчение с вълново число $\bar{\nu}$ = 2000 cm^{-1}. (1 т.)	Решение: $\lambda = \frac{1}{\bar{\nu}} = \frac{1}{2 \times 10^3\ cm^{-1}} = 0.5 \times 10^{-3}\ cm =$ $= 0.5 \times 10^{-3} \times 10^{-2}\ m = 0.5 \times 10^{-5}\ m =$ $= 0.5 \times 10^{-5} \times 10^{6}\ \mu m = 0.5 \times 10^{1}\ \mu m = 5\ \mu m$

Задача 2. (6 т.) С методите на вибрационната спектроскопия

2.1. Пресметнете броя на трептенията в молекулата на етилена, $H_2C=CH_2$. (молекулата **не** е линейна!) (1 т.)	Решение: $f = 3N-6 = 3\times 6-6 = 18-6 = 12$
2.2. Изобразете формите на двете <u>симетричните валентни</u> нормални трептения в тази молекула, в които участва връзката C-H. Наименовайте отделните трептения по вид и симетрия. (3 т.)	Решение: 
2.3. Кое от тези две трептения ще е активно в ИЧ спектъра? Защо? (1 т.)	Решение: $\nu_s^{o.p}$ – променя диполния момент на молекулата
2.4. Кое от тези две трептения ще е активно в Раман спектъра? Защо? (1 т.)	Решение: $\nu_s^{i.p.}$ – променя поляризуемостта на молекулата

Задача 3. (10 т.) Определете структурата на съединението от фигура 1 въз основа на неговия ИЧ спектър. Молекулната формула е C_8H_{10}, т.т. -93.4 °C, т.к. 136.19 °C. Положението на ивиците е дадено в $см^{-1}$. Съединението се състои от три структурни фрагмента **A**, **B** и **C**, които са свързани в реда **A-B-C**.

3.1. Определете еквивалентите на ненаситеност. (1 т.)	Решение: $E.H. = \frac{(2n+2)-\sum_i^{кл} He}{2} = \frac{2\times 8+2-\sum_i^{10} 1}{2} = \frac{18-10}{2} = 8/2 = 4$
3.2. За първия фрагмент **A** характеристичните ивици са в областите: • 3100 - 3000 $см^{-1}$ • около 1600 и 1500 $см^{-1}$ • 900 - 650 $см^{-1}$ Напишете структурната формула на фрагмента. (1 т.)	Решение:

3.3. Отнесете ивиците на фрагмент **A**, като напишете вълновите им числа и тяхното отнасяне. (2 т.)	Решение: $\nu(C_{sp^2}-H)$: 3079 cm^{-1}, 3059 cm^{-1}, 3021 cm^{-1} $\nu(C=C)$: 1598 cm^{-1}; 1490 cm^{-1}, 1447 cm^{-1} $\gamma(C_{sp^2}-H)$: 741 cm^{-1}, 697 cm^{-1}
3.4. За втория фрагмент **B** характеристичните ивици са в областите: • 3000 - 2800 cm^{-1} • около 1465 cm^{-1} Напишете структурната формула на фрагмента. (1 т.)	Решение: $-CH_2-$
3.5. Отнесете ивиците на фрагмент **B**, като напишете вълновите им числа и тяхното отнасяне. (1 т.)	Решение: $\nu_{as}(CH_2)$ = 2925 cm^{-1} $\delta(CH_2)$ = 1447 cm^{-1} $\rho(CH_2)$ = 770 cm^{-1}
3.6. За третия фрагмент **C** характеристичните ивици са в областите: • 3000 - 2800 cm^{-1} • около 1460 и 1380 cm^{-1} Напишете структурната формула на фрагмента. (1 т.)	Решение: $-CH_3$
3.7. Отнесете ивиците на фрагмент **C**, като напишете вълновите им числа и тяхното отнасяне. (2 т.)	Решение: $\nu_{as}(CH_3)$ = 2959 cm^{-1} $\nu_s(CH_3)$ = 2867 cm^{-1} $\delta_s(CH_3)$ = 1388 cm^{-1}
3.8. Напишете структурната формула на съединението. (1 т.)	Решение: 

Задача 4. (7 т.) На фигура 2 е даден инфрачервеният спектър на анилин, $C_6H_5NH_2$. Отнесете следните ивици. Имате по 1 т. за правилно отнесена група от ивици.

	Отговори:
3430 cm^{-1}	$\nu_{as}(NH_2)$
3353 cm^{-1}	$\nu_{s}(NH_2)$
3070 и 3032 cm^{-1}	$\nu(C_{sp^2}-H)$
3011 cm^{-1}	$\nu(C_{sp^2}-H)$
1621 cm^{-1}	$\delta(NH_2)$
1603 и 1499 cm^{-1}	$\nu(C=C)$
753 и 691 cm^{-1}	$\gamma(C_{sp^2}-H)$

Задача 5. (2 т.) Пресметнете дебелината на кюветата в mm, ако между вълнови числа 2425.5 и 1418.1 cm^{-1} има 20 максимума.

Решение:

$$b(mm) = \frac{n \times 10}{2(\bar{\nu}_1 - \bar{\nu}_2)} = \frac{20 \times 10}{2(2425.5 - 1418.1)} =$$

$$= \frac{100}{1007.4} = 0.099265 = 0,0993\ mm$$

Задача 6. (2 т.). K-преходът на бутадиена има максимум при 217 nm. Молярната абсорбируемост при тази дължина на вълната е $\varepsilon_{217} = 1.1 \times 10^4\ l\ mol^{-1}\ cm^{-1}$. Пресметнете величината на максимума в спектъра, в единици абсорбция, за разтвор с концентрация **C** = $2.0 \times 10^{-5}\ mol\ l^{-1}$, измерен в кювета с дебелина 0.5 cm. (**2 т.**)

Решение:

$$A = \varepsilon \times b \times C = 1,1 \times 10^4\ l \cdot mol^{-1} \cdot cm^{-1} \times 0,5\ cm \times 2,0 \times 10^{-5}\ mol\ l^{-1} =$$

$$= 1,1 \times 0,5 \times 2,0 \times 10^{4-5} = 1,1 \times 10^{-1} = 0,11\ a.u.$$