

Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Магистри 2014/2015 г.

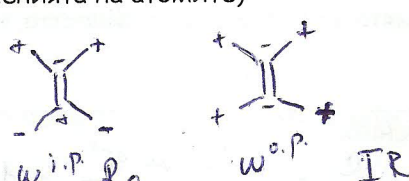
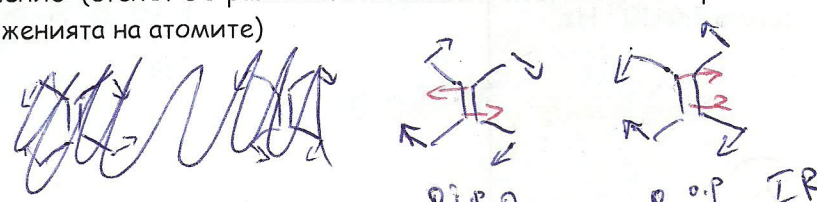
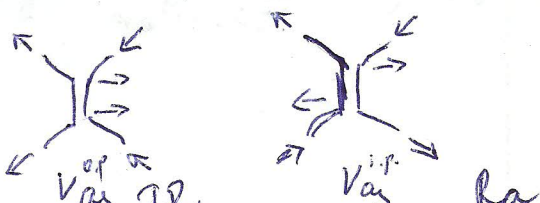
Мария Френкева				Фак. No	
име, презиме, фамилия					
Магистри	1	17.11.14	100	24	6,25
специалност, курс	ВАРИАНТ	ДАТА	Точки общо	Точки	Оценка

Задача 1. (4 т.) В изчисленията използвайте стойността на скоростта на светлината във вакуум, $c = 3.0 \times 10^8$ m/s.

<p>1.1. Изчислете дължината на вълната в nm на лъчение с честота 2.0×10^{16} Hz.</p>	<p>Решение:</p> $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}}{2 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}} = 1,5 \cdot 10^{-8} \text{ m} \cdot 10^9 \text{ nm} = 1,5 \cdot 10^1 = 15 \text{ nm}$
<p>(1 т.)</p> <p>1.2. Изчислете честота в Hz на лъчение с дължината на вълната 300 nm.</p>	<p>Решение:</p> $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}}{300 \cdot 10^{-9} \text{ m}} = \frac{3 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}}{3 \cdot 10^{-7}} = 1 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1} = 1 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$
<p>(1 т.)</p> <p>1.3. Изчислете вълновото число в cm^{-1} на ИЧ лъчение с дължина на вълната $\lambda = 25 \mu\text{m}$.</p>	<p>Решение:</p> $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \bar{\nu} = \frac{1}{25 \cdot 10^{-6} \text{ m}} = \frac{0,04 \cdot 10^6}{\text{m}^2} = \frac{0,04 \cdot 10^6}{10^{-2} \text{ cm}^2} = 0,04 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1} = 400 \text{ cm}^{-1}$
<p>(1 т.)</p> <p>1.4. Изчислете дължината на вълната в μm на ИЧ лъчение с вълново число $\bar{\nu} = 2000 \text{ cm}^{-1}$.</p>	<p>Решение:</p> $\lambda = \frac{1}{\bar{\nu}} = \frac{1}{2000 \text{ cm}^{-1}} = 0,5 \cdot 10^{-3} \text{ cm} = 0,5 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-2} \text{ m} = 0,5 \cdot 10^{-5} \cdot 10^6 \mu\text{m} = 50 \mu\text{m}$

Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Вариант 1.

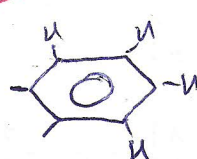
Задача 2. (18 т.) С методите на вибрационната спектроскопия ...

<p>2.1. Пресметнете броя на трептенията в молекулата на етена, $\text{CH}_2=\text{CH}_2$. (1 т.)</p>	<p>Решение:</p> $3N - 6 = 3 \cdot 6 - 6 = 12$					
<p>2.2. Нарисувайте двете ветрилни трептения в етена, $\omega^{i.p.}$ и $\omega^{o.p.}$. Кое тях е активно в ИЧ и кое в Раман спектъра? (4 т.)</p>	<p>Решение: (етенът е в равнината на листа и използвайте + и - за движенията на атомите)</p>  <p style="text-align: center;">$\omega^{i.p.}$ Ra $\omega^{o.p.}$ IR</p>					
<p>2.3. Нарисувайте двете махални трептения в етена, $\rho^{i.p.}$ и $\rho^{o.p.}$. Кое тях е активно в ИЧ и кое в Раман спектъра? (4 т.)</p>	<p>Решение: (етенът е в равнината на листа и използвайте стрелки за движенията на атомите)</p>  <p style="text-align: center;">$\rho^{i.p.}$ Ra $\rho^{o.p.}$ IR</p>					
<p>2.4. Нарисувайте двете антисиметрични трептения в етена. Напишете означенията им. Кое тях е активно в ИЧ и кое в Раман спектъра? (5 т.)</p>	<p>Решение: (етенът е в равнината на листа и използвайте стрелки за движенията на атомите)</p>  <p style="text-align: center;">$\nu_{as}^{o.p.}$ IR $\nu_{as}^{i.p.}$ Ra</p>					
<p>Отговор:</p> <table border="1" style="width: 100px; height: 100px;"> <tr><td>a</td></tr> <tr><td>b</td></tr> <tr><td>c</td></tr> <tr><td><input checked="" type="checkbox"/> d</td></tr> </table> <p>(2 т.)</p>	a	b	c	<input checked="" type="checkbox"/> d	<p>2.5. Правилото за алтернативна забрана за молекули с център на симетрия гласи:</p> <p>a) Ако една ивица е забранена в ИЧ спектъра, то тя е разрешена в Раман спектъра. b) Ако една ивица е забранена в Раман спектъра, то тя е разрешена в ИЧ спектъра. c) Ивици, забранени в ИЧ спектрите са разрешени в Раман спектрите и ивици, забранени в Раман спектрите са разрешени в ИЧ спектрите. <input checked="" type="checkbox"/> d) Ивици, разрешени в ИЧ спектрите са забранени в Раман спектрите и ивици, разрешени в Раман спектрите са забранени в ИЧ спектрите.</p>	
a						
b						
c						
<input checked="" type="checkbox"/> d						
<p>Отговор:</p> <table border="1" style="width: 100px; height: 100px;"> <tr><td>a</td></tr> <tr><td>b</td></tr> <tr><td>c</td></tr> <tr><td><input checked="" type="checkbox"/> d</td></tr> <tr><td>e</td></tr> </table> <p>(2 т.)</p>	a	b	c	<input checked="" type="checkbox"/> d	e	<p>2.6. Честотите на валентните O-H трептения ν_s и ν_{as} във H_2O и H_2O_2 (водороден пероксид) се различават значително поради:</p> <p>a) наличието на тежък изотопен атом в $^2\text{H}^1\text{O}^1\text{H}$. <input checked="" type="checkbox"/> b) разлика в ъглите H-O-H в двете съединения. <input checked="" type="checkbox"/> c) разлика в хибридизацията на кислородния атом в двете съединения, съответно sp^2 и sp^3. <input checked="" type="checkbox"/> d) по-силното вибрационно взаимодействие между двете валентни трептения във H_2O. e) Ферми резонанс във H_2O.</p>
a						
b						
c						
<input checked="" type="checkbox"/> d						
e						

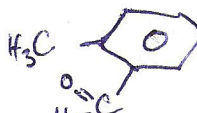
167.

Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Вариант 1.

Задача 3. (12 т.) Определете структурата на съединението от фигура 1 въз основа на неговия ИЧ спектър, заснет в капиларен слой. Молекулната формула е C_8H_8O . Положението на ивиците е дадено в cm^{-1} . Съединението се състои от три структурни фрагмента А, В, С, които са свързани в реда А-В-С.

<p>3.1. Определете еквивалентите на ненаситеност.</p> <p>(1 т.)</p>	<p>Решение:</p> $EI = \frac{(2 \cdot 8 + 2) - 8}{2} = 5$
<p>3.2. За първия фрагмент А характеристичните ивици са в областите:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 3000 - 2800 cm^{-1} • около 1460 cm^{-1} • около 1380 cm^{-1} <p>Напишете структурната формула на фрагмента.</p>	<p>Решение (1 т.):</p> <p style="text-align: center;">- CH₃</p>
<p>3.3. Отнесете ивиците на фрагмент А като напишете вълновите им числа и тяхното отнасяне.</p> <p>(2 т.)</p>	<p>Решение:</p> <p>$\nu_{as} CH_3 = 2962$</p> <p>$\delta_{as} CH_3 = 1460$</p> <p>$\delta_s CH_3 = 1384$</p>
<p>3.4. За втория фрагмент В характеристичните ивици са в областите:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 3100 - 3000 cm^{-1} • около 1600 и 1500 cm^{-1} • една ивица в 900 - 650 cm^{-1} <p>Напишете структурната формула на фрагмента.</p>	<p>Решение (1 т.):</p> 
<p>3.5. Отнесете ивиците на фрагмент В като напишете вълновите им числа и тяхното отнасяне.</p> <p>(2 т.)</p>	<p>Решение:</p> <p>$\nu(C_{sp^2}-H) = 3070$ $\nu(C_{sp^2}-H) = 3026$</p> <p>$\nu(C=C) = 1600$ $\nu(C=C) = 1488$</p> <p>$\mu(C_{sp^2}-H) = 756$</p>
<p>3.6. За третия фрагмент С характеристичните ивици са в областите:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 1735-1675 cm^{-1}; • обертон на това трептене; • около 1388 cm^{-1}; • обертонът на това трептене дава Ферми резонанс с $\nu(C-H)$, което води до две ивици около 2820 cm^{-1} и 2720 cm^{-1}. 	<p>Решение (1 т.): Напишете структурната формула на фрагмента.</p> <p style="text-align: center;"> $\begin{array}{c} O \\ \\ C - H \end{array}$ </p>

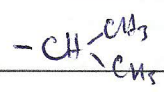
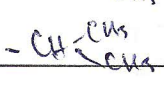
Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Вариант 1.

<p>3.7. Отнесете ивиците на фрагмент С като напишете вълновите им числа и тяхното отнасяне.</p> <p>(2 т.) 1т.</p>	<p>Решение:</p> <p>$\nu(C=O) = 1696$ $2\nu(C=O) = 3387$</p> <p>$\nu(C-H) = 1388$ $\nu(C-H) = 2828, 2736$</p>
<p>3.8. Напишете структурната формула на съединението.</p> <p>(2 т.)</p>	<p>Решение:</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p style="text-align: right;">11т.</p>

Задача 4. (7 т.) На фигура 2 е даден ИЧ спектър на фенилацетилен, $C_6H_5C\equiv CH$. Отнесете следните ивици. Имате по 1 т. за правилно отнесена група от ивици.

3292 cm^{-1}	Отговори: $\nu(C_{sp}-H)$ 1
3081 cm^{-1} и 3058 cm^{-1}	$\nu(C_{sp^2}-H)$ 1
2110 cm^{-1}	$\nu(C\equiv C)$ 1
1598 cm^{-1} и 1488 cm^{-1}	$\nu(C\equiv C)$ 1
1248 cm^{-1}	2 $\nu(C_{sp}-H)$ 1
757 cm^{-1} и 691 cm^{-1}	$\nu(C_{sp^2}-H)$ 1
667 cm^{-1} и 622 cm^{-1}	$\nu(C_{sp}-H)$ 1

Задача 5. (7 т.) На фигура 3 е даден ИЧ спектър изопропилбензен, $C_6H_5CH(CH_3)_2$. Отнесете следните ивици. Имате по 1 т. за правилно отнесена група от ивици.

3083 cm^{-1}	Отговори: $\nu(C_{sp^2}-H)$ 1
3069 cm^{-1} и 3029 cm^{-1}	$\nu(C_{sp^2}-H)$ 1
2963 cm^{-1} и 2889 cm^{-1}	$\nu_{as} CH_3$ и $\nu_s CH_3$ 1
1605 cm^{-1} и 1496 cm^{-1}	$\nu(C\equiv C)$ 1
1386 cm^{-1}	$\delta_{sp}^{i.p.} (CH_3)$  1
1364 cm^{-1}	$\delta_s^{i.p.} CH_3$  1
761 cm^{-1} и 697 cm^{-1}	$\nu(C_{sp^2}-H)$ 1

Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Вариант 1.

Задача 6. (2 т.) Пресметнете дебелината на кюветата в mm, ако между вълнови числа 2699.5 cm^{-1} и 2098.5 cm^{-1} има 6 максимума.

Решение:

$$d = \frac{6 \cdot 10}{2(2699,5 - 2098,5)} = \frac{30}{601} = 0,04991 \text{ mm} \sim 0,05 \text{ mm}$$

Задача 7. (16 т.) За структурата и ^1H -ЯМР спектъра от фигура 4 (3,4-диметоксибензалдехид) отговорете на следните въпроси.

7.1. (1 т.) Шестте водородни атоми на двете метокси групи в 3,4-диметоксиалдехид:

са магнитно еквивалентни.

не са магнитно еквивалентни.

(зачертайте с голям хикс неверното)

7.2. (1 т.) Сигналите на двете метокси групи (в ppm) са извън показания спектрален интервал. Те ще бъдат

на различни места

ще съвпадат

(зачертайте с голям хикс неверното)

7.3. (2 т.) Сигналите на двете метокси групи (в ppm) ще бъдат с мултиплетност ss и ss
~~dd~~ ~~dd~~
(изберете между s, d, t, q, dd, dq, qq) ss

7.4. (2 т.) Площта под сигналите на двете метокси групи и тази на трите протона А, М и Х ще се отнасят така както 3 : 3 : 1 : 1 : 1.

7.5. (2 т.) Площта под сигналите на алдехидната група (в ppm) и трите протона А, М и Х ще се отнасят така както 1 : 1 : 1 : 1.

7.6. (2 т.) Сигналят на алдехидния протон ще бъде с мултиплетност ts (няма го в показания спектрален интервал) t s
(изберете между s, d, t, q, dd, dq, qq)

В следващите въпроси заградете с кръгче **ВЕРНИЯ** отговор. Имате по 1 точка на отговор.

7.7. Най-левият дублет от дублети е сигнал на

- а) А протоните б) М протоните; в) Х протоните

7.8. Средният дублет от дублети е сигнал на

- а) А протоните б) М протоните; в) Х протоните

7.9. Най-десният дублет от дублети е сигнал на

- а) А протоните б) М протоните; в) Х протоните

7.10. Спин-спиновата константа J_{AM} е:

- а) 8.5 Hz б) 2.5 Hz в) 0.5 Hz д) 11 Hz е) 0 Hz

7.11. Спин-спиновата константа J_{AX} е:

- а) 8.5 Hz б) 2.5 Hz в) 0.5 Hz д) 11 Hz е) 0 Hz

7.12. Спин-спиновата константа J_{MX} е:

- а) 8.5 Hz б) 2.5 Hz в) 0.5 Hz д) 11 Hz е) 0 Hz

Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Вариант 1.

Задача 8. (6 т.) С помощта на адитивните схеми изчислете химичното отместване на протоните А, В, С и D в съединението от фигура 5. Пишете мерните единици!

<p>Решение за А протоните (1 т.):</p> <p>начална стойност: <u>5,28</u></p> <p>заместители:</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td style="width: 80%;"><u>H_ogem</u></td><td style="width: 20%; text-align: right;"><u>0</u></td></tr> <tr><td><u>H_otrans</u></td><td style="text-align: right;"><u>0</u></td></tr> <tr><td><u>CH₃ cis</u></td><td style="text-align: right;"><u>0,37</u></td></tr> </table> <p>предсказана стойност: <u>5,65 ppm</u></p>	<u>H_ogem</u>	<u>0</u>	<u>H_otrans</u>	<u>0</u>	<u>CH₃ cis</u>	<u>0,37</u>	<p>Решение за В протоните (2 т.):</p> <p>начална стойност: <u>5,28</u></p> <p>заместители:</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td style="width: 80%;"><u>H_ocis</u></td><td style="width: 20%; text-align: right;"><u>0</u></td></tr> <tr><td><u>H_otrans</u></td><td style="text-align: right;"><u>-0,10</u></td></tr> <tr><td><u>CH₃ gem</u></td><td style="text-align: right;"><u>0,44</u></td></tr> </table> <p>предсказана стойност: <u>5,62 ppm</u></p>	<u>H_ocis</u>	<u>0</u>	<u>H_otrans</u>	<u>-0,10</u>	<u>CH₃ gem</u>	<u>0,44</u>
<u>H_ogem</u>	<u>0</u>												
<u>H_otrans</u>	<u>0</u>												
<u>CH₃ cis</u>	<u>0,37</u>												
<u>H_ocis</u>	<u>0</u>												
<u>H_otrans</u>	<u>-0,10</u>												
<u>CH₃ gem</u>	<u>0,44</u>												
<p>Решение за С протоните (2 т.):</p> <p>начална стойност: <u>5,28</u></p> <p>заместители:</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td style="width: 80%;"><u>H_ocis</u></td><td style="width: 20%; text-align: right;"><u>0</u></td></tr> <tr><td><u>H_ogem</u></td><td style="text-align: right;"><u>1,35</u></td></tr> <tr><td><u>CH₃ trans</u></td><td style="text-align: right;"><u>-0,29</u></td></tr> </table> <p>предсказана стойност: <u>6,34 ppm</u></p>	<u>H_ocis</u>	<u>0</u>	<u>H_ogem</u>	<u>1,35</u>	<u>CH₃ trans</u>	<u>-0,29</u>	<p>Решение за D протоните (1 т.):</p> <p>начална стойност: <u>7,28</u></p> <p>заместители:</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td style="width: 80%;"><u>COOH o</u></td><td style="width: 20%; text-align: right;"><u>0,63</u></td></tr> <tr><td><u>CH₃ o</u></td><td style="text-align: right;"><u>0,20</u></td></tr> </table> <p>предсказана стойност: <u>8,10 ppm</u></p>	<u>COOH o</u>	<u>0,63</u>	<u>CH₃ o</u>	<u>0,20</u>		
<u>H_ocis</u>	<u>0</u>												
<u>H_ogem</u>	<u>1,35</u>												
<u>CH₃ trans</u>	<u>-0,29</u>												
<u>COOH o</u>	<u>0,63</u>												
<u>CH₃ o</u>	<u>0,20</u>												

Задача 9. (21 т.) За структурите от фигура 6 отговорете на следните въпроси. Съединенията са (Z)-1,2-дифлуороетен, I; (E)-1,2-дифлуороетен, II; флуорометан, III; дифлуорометан, IV.

<p>9.1. (1 т.) Водородните атоми в структура I</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.</td> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.</td> </tr> </table> <p>(зачертайте с горям хикс неверното)</p>	<input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.	<p>9.2. (1 т.) Флуорните атоми в структура I</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.</td> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.</td> </tr> </table> <p>(зачертайте с горям хикс неверното)</p>	<input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.
<input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.				
<input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.				
<p>9.3. (1 т.) Водородните атоми в структура II</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.</td> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.</td> </tr> </table> <p>(зачертайте с горям хикс неверното)</p>	<input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.	<p>9.4. (1 т.) Флуорните атоми в структура II</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.</td> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.</td> </tr> </table> <p>(зачертайте с горям хикс неверното)</p>	<input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.
<input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.				
<input checked="" type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.				
<p>9.5. (1 т.) Водородните атоми в структура III</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.</td> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input checked="" type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.</td> </tr> </table> <p>(зачертайте с горям хикс неверното)</p>	<input type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input checked="" type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.	<p>9.6. (1 т.) Водородните атоми в структура IV</p> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.</td> <td style="width: 50%; border: 1px solid black; padding: 2px;"><input checked="" type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.</td> </tr> </table> <p>(зачертайте с горям хикс неверното)</p>	<input type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input checked="" type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.
<input type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input checked="" type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.				
<input type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни.	<input checked="" type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни.				

Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Вариант 1.

<p>9.7. (1 т.) Флуорните атоми в структура IV са <input type="checkbox"/> са магнитно еквивалентни. <input checked="" type="checkbox"/> не са магнитно еквивалентни. (зачертайте с горям хикс неверното)</p>	<p>9.8. (2 т.) В протонния спектър на смес от съединения III и IV са наблюдавани два мултиплета при 4.10 ppm и 5.45 ppm. Кой мултиплет на кои протони е? (заградете с кръгче верния отговор)</p> <p>4.10 ppm е на: <input checked="" type="checkbox"/> CH₃F <input type="checkbox"/> CH₂F₂</p> <p>5.45 ppm е на: <input type="checkbox"/> CH₃F <input checked="" type="checkbox"/> CH₂F₂</p>
<p>9.9. (1 т.) Водородните атоми и флуорните атоми в структура I съставят <u>AA'XX'</u> спинова система.</p>	<p>9.10. (1 т.) Водородните и флуорните атоми в структура II съставят <u>AA'XX'</u> спинова система.</p>
<p>9.11. (1 т.) Водородните атоми и флуорните атоми в структура III съставят <u>A₃X</u> спинова система.</p>	<p>9.12. (1 т.) Водородните атоми и флуорните атоми в структура IV съставят <u>A₂X₂</u> спинова система.</p>
<p>9.13. (1 т.) В протонния спектър на структура III ще се наблюдава следният мултиплет <u>d</u> (попълнете с s, d, t, q, dd и т.н.)</p>	<p>9.14. (1 т.) В ¹⁹F-ЯМР спектър на структура III ще се наблюдава следният мултиплет <u>q</u> (попълнете с s, d, t, q, dd и т.н.)</p>
<p>9.15. (1 т.) В протонния спектър на структура IV ще се наблюдава следният мултиплет <u>t</u> (попълнете с s, d, t, q, dd и т.н.)</p>	<p>9.16. (1 т.) В ¹⁹F-ЯМР спектър на структура IV ще се наблюдава следният мултиплет <u>t</u> (попълнете с s, d, t, q, dd и т.н.)</p>
<p>9.17. (1 т.) От протонния спектър на структура III е установена константа J = 46.36 Hz. Това е константата (заградете верния отговор с кръгче)</p> <p>²J_{HH} <input checked="" type="checkbox"/> ²J_{HF} ³J_{HH} ³J_{HF} ⁴J_{HH} ⁴J_{HF}</p>	<p>9.18. (1 т.) От протонния спектър на структура IV е установена константа J = 50.22 Hz. Това е константата (заградете верния отговор с кръгче)</p> <p>²J_{HH} <input checked="" type="checkbox"/> ²J_{HF} ³J_{HH} ³J_{HF} ⁴J_{HH} ⁴J_{HF}</p>

20т.

Изчислете с адитивните схеми сигналите на протоните в структури III и IV

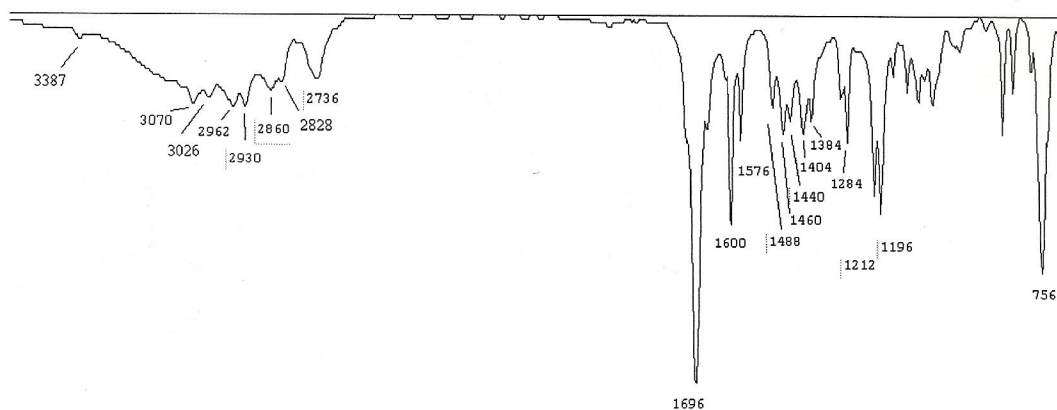
<p>9.19. Решение за CH₃F протоните (1т.):</p> <p>начална стойност: <u>0,87</u></p> <p>заместители:</p> <p><u>F</u> <u>3,43</u></p> <p>предсказана стойност: <u>4,3 ppm</u></p>	<p>9.20. Решение за CH₂F₂ протоните (1т.):</p> <p>начална стойност: <u>1,2</u></p> <p>заместители:</p> <p><u>F</u> <u>3,14</u></p> <p>предсказана стойност: <u>4,34 ppm</u></p>
---	---

Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Вариант 1.

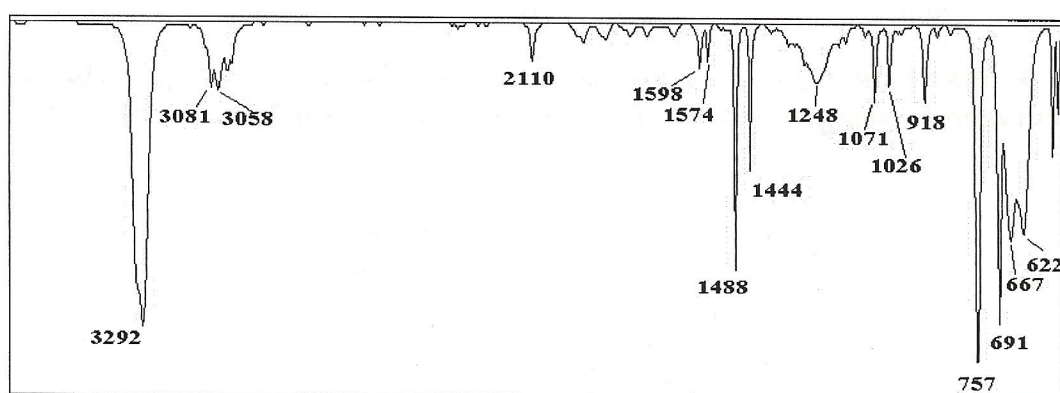
Задача 10. (7т.) За спектъра на АВ система от фигура 7 направете следните изчисления. Работете с точност до десетохилядни от ppm и пишете мерните единици.

<p>1. Намерете центъра на спектъра δ_0.</p> $\delta_0 = (6,838 + 6,827 + 6,814 + 6,803) / 4 =$ $= 27,292 / 4 = 6,8205 \text{ ppm}$	<p>2. Намерете разстоянието между ивиците $\Delta\delta_{1,3}$.</p> $\Delta\delta_{1,3} = 6,838 - 6,814 = 0,024 \text{ ppm}$
<p>3. Намерете спин-спиновата константа $J_{A,B}$ в ppm и в Hz.</p> $J_{A,B}(\text{ppm}) = 6,838 - 6,827 = 0,011 \text{ ppm}$ $J_{A,B}(\text{Hz}) = 0,011 \cdot 770 \cdot 10^6 =$ $= 8,47 \cdot 10^6 \text{ Hz}$	<p>4. Намерете величината $\Delta\delta_{A,B}$.</p> $\Delta\delta_{A,B} = \sqrt{0,024^2 - 0,011^2} =$ $= 0,0204 \text{ ppm}$ <p>0,0213</p> <p>ST.</p>
<p>5. Намерете химичното отместване на А, δ_A.</p> $\delta_A = 6,8205 + 1/2 \cdot 0,0204 =$ $= 6,8307 \text{ ppm}$	<p>4. Намерете химичното отместване на В, δ_B.</p> $\delta_B = 6,8205 - 1/2 \cdot 0,0204 =$ $= 6,8073 \text{ ppm}$

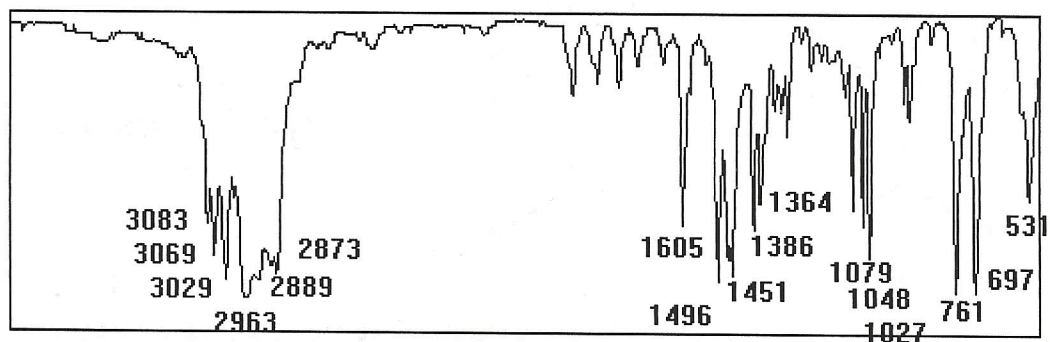
Изпит по
Съвременни насоки в молекулния спектрален анализ
Вариант 1.



Фигура 1. ИЧ спектър на съединение с молекулна формула C_7H_9N (за задача 3).

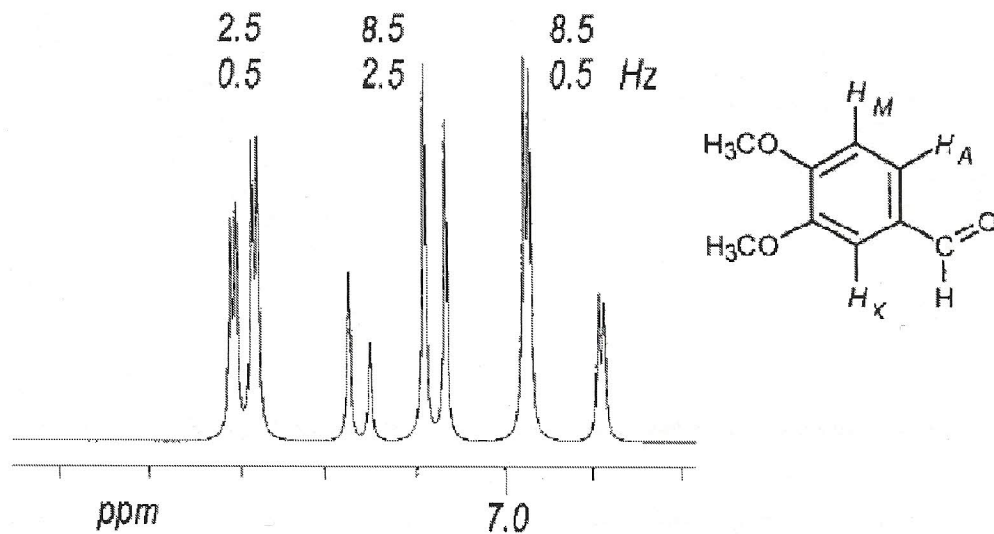


Фигура 2. ИЧ спектър на фенилацетилен, $C_6H_5C\equiv CH$ (за задача 4).

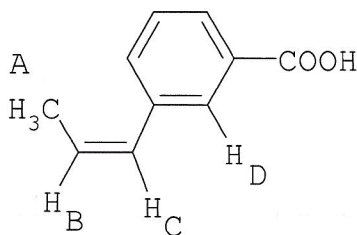


Фигура 3. Инфрарчервеният спектър на изопропилбензен, $C_6H_5CH(CH_3)_2$ (за задача 5).

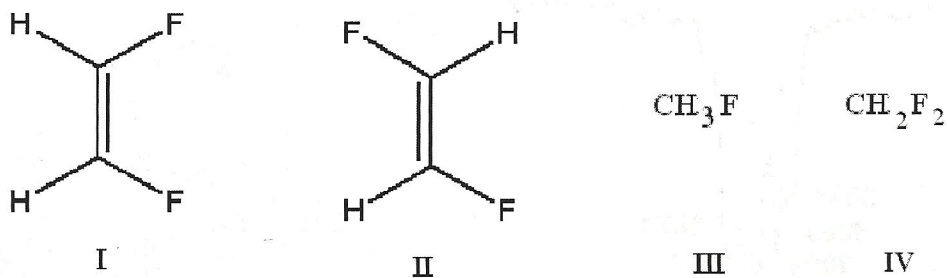
Изпит по
Съвременни насоки в молекулярния спектрален анализ
Вариант 1.



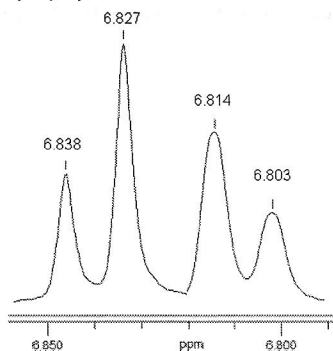
Фигура 4. ^1H -ЯМР спектър на 3,4-диметоксibenзалдехид (за задача 7). Над съответните три дублет от дублета са дадени константите на спин-спиново взаимодействие в Hz.



Фигура 5. Структура на съединението от задача 8.



Фигура 6. Структурите за задача 9. Съединенията са (Z)-1,2-дифлуороетен, (E)-1,2-дифлуороетен, флуорометан и дифлуорометан.



Фигура 7. ^1H ЯМР спектър на АВ система. Честота на апарата е $\nu_0 = 770 \text{ MHz}$ (за задача 10).