

ТЕСТ

по

Инструментални методи за анализ
(¹H-ЯМР спектроскопия)

Слава Христова Цокева			0405661012		
име, презиме, фамилия			Фак. No		
КХ, III курс	6	20	20	6.00	
специалност, курс	ВАРИАНТ	ДАТА	Точки общо	Точки	Оценка

Задача 1. (6т.) С помощта на адитивните схеми изчислете химичното отместване на протоните А, В, С и D в съединението от фигура 1. Пишете мерните единици!

<p>Решение за А протоните (1т.):</p> <p>начална стойност: <u>1.20 ppm</u></p> <p>заместители:</p> <p>α (C=C) <u>0.45 ppm</u></p> <p>α (-OH) <u>2.30 ppm</u></p> <p>ρ (арил) <u>0.53 ppm</u></p> <p>предсказана стойност: <u>4.48 ppm</u></p>	<p>Решение за В протоните (2т.):</p> <p>начална стойност: <u>5.28 ppm</u></p> <p>заместители:</p> <p>gem (-CH-OH) <u>0.64 ppm</u></p> <p>cis (-арил) <u>0.34 ppm</u></p> <p>trans (-H) <u>0.00 ppm</u></p> <p>предсказана стойност: <u>6.32 ppm</u></p>
<p>Решение за С протоните (2т.):</p> <p>начална стойност: <u>5.28 ppm</u></p> <p>заместители:</p> <p>gem (-арил) <u>1.35 ppm</u></p> <p>cis (-CH₂-OH) <u>-0.02 ppm</u></p> <p>trans (-H) <u>0.00 ppm</u></p> <p>предсказана стойност: <u>6.61 ppm</u></p>	<p>Решение за D протоните (1т.):</p> <p>начална стойност: <u>7.24 ppm</u></p> <p>заместители:</p> <p>m- (C=C) <u>0.20 ppm</u></p> <p>o- (-CHO) <u>0.54 ppm</u></p> <p>предсказана стойност: <u>8.01 ppm</u></p>

6т.

Задача 2. (8т.) За спектъра от фигура 2 отговорете на следните въпроси.

2.1. (2 т.) Триплетът около 1.05 ppm е сигнал на <u>-CH₃</u> групата.	2.2. (2 т.) Квартетът около 2.2 ppm е сигнал на <u>-CH₂</u> групата.
2.3. (1 т.) Площите под квартета около 2.2 ppm и триплетата около 1.05 ppm се отнасят приблизително така както <u>2:3</u> .	2.4. (1 т.) Площите под квартета около 2.2 ppm и синглетата около 6.3 ppm се отнасят приблизително така както <u>1:1</u> .
2.5. (1 т.) Интензитетите в един квинтет са в отношение приблизително <u>1:4:6:4:1</u>	2.6. (1 т.) Интензитетите в един октет са в отношение приблизително <u>1:7:21:35:35:21:7:1</u>

8т.

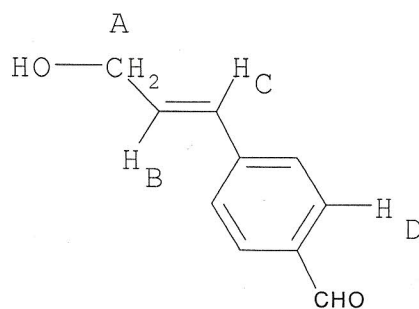
Задача 3. (6т.) За спектъра на АВ система от фигура 3 направете следните изчисления. Работете с точност до десетохилядни от ppm и пишете мерните единици.

1. Намерете центъра на спектъра δ_0 . $\delta_0 = \frac{6.852 + 6.840 + 6.821 + 6.809}{4} = 6.8305 \text{ ppm}$	2. Намерете разстоянието между ивиците $\Delta\delta_{1,3}$. $\Delta\delta_{1,3} = \delta_1 - \delta_3 = 6.852 - 6.821 \text{ ppm}$ $\Delta\delta_{1,3} = 0.0310 \text{ ppm}$
3. Намерете спин-спиновата константа $J_{A,B}$ в ppm и в Hz. $J_{A,B}(\text{ppm}) = \delta_1 - \delta_2 = (6.852 - 6.840) \text{ ppm}$ $J_{A,B}(\text{ppm}) = 0.0120 \text{ ppm}$ $J_{A,B}(\text{Hz}) = (\delta_1 - \delta_2) \nu_0 = 0.0120 \text{ ppm} \times 450 \text{ MHz}$ $J_{A,B}(\text{Hz}) = 0.0120 \times 10^{-6} \times 450 \times 10^6 \text{ Hz} = 5.4 \text{ Hz}$	4. Намерете величината $\Delta\delta_{A,B}$. $\Delta\delta_{A,B} = \sqrt{\Delta\delta_{1,3}^2 - J^2}$ $\Delta\delta_{A,B} = \sqrt{0.0310^2 \text{ ppm} - 0.0120^2 \text{ ppm}}$ $\Delta\delta_{A,B} = \sqrt{0.000817} \text{ ppm} = 0.0286 \text{ ppm}$
5. Намерете химичното отместване на А, δ_A . $\delta_A = \delta_0 + \frac{1}{2} \Delta\delta_{A,B} = 6.8305 \text{ ppm} + \frac{1}{2} 0.0286 \text{ ppm} = 6.8448 \text{ ppm}$	4. Намерете химичното отместване на В, δ_B . $\delta_B = \delta_0 - \frac{1}{2} \Delta\delta_{A,B} = 6.8305 \text{ ppm} - \frac{1}{2} 0.0286 \text{ ppm} = 6.8162 \text{ ppm}$

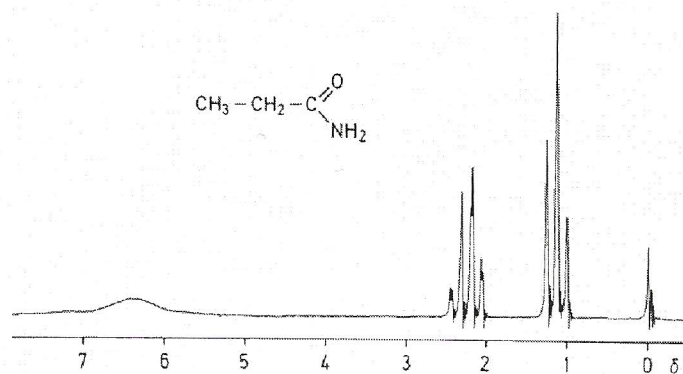
6т.

НЕ ДРАСКАЙТЕ НА ТОЗИ ЛИСТ!

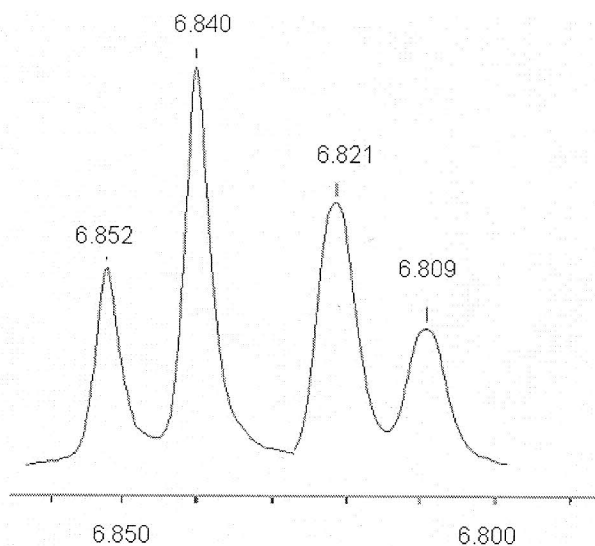
Тест по Инструментални методи за анализ в частта по ^1H ЯМР спектроскопия.



Фигура 1. Структура на съединението за задача 1.



Фигура 2. ^1H ЯМР спектър на етанол, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$.



Фигура 3. ^1H ЯМР спектър на АВ система. Честота на апарата е $\nu_0 = 450$ MHz.

НЕ ДРАСКАЙТЕ НА ТОЗИ ЛИСТ!