

Wytyczne do I kolokwium ze spektroskopii

Wytyczne odnoszą się do treści zawartych w materiałach do chemii organicznej podanych na stronie Katedry Chemii Organicznej – w dalszym tekście są nazywane w skrócie MATERIAŁY

Wiadomości ogólne

- Obowiązuje materiał zawarty we „Wstępie do spektroskopii. Spektroskopii UV” (MATERIAŁY).
- Obowiązuje znajomość wszystkich danych z rysunku (Rys. 4) zamieszczonego na stronie 4 i w tabeli (Tabela2) na stronie 5 w części „Wstęp do spektroskopii. Spektroskopia UV” (MATERIAŁY).
- Obowiązuje znajomość masy atomowej wodoru, węgla, azotu, tlenu, chloru i bromu. Dla chloru i bromu należy znać masy izotopów.

MS

Należy umieć zinterpretować widmo w zakresie przedstawionym w skrypcie dotyczącym SM na stronie 29 („Interpretacja widma masowego w MS z jonizacją EI. Uwagi ogólne.”), oraz odpowiedzieć na pytania 2, 3, 5, 6, 12 – 14, z rozdziału „Zadania” umieszczonym na końcu skryptu do MS.

Na tym kolokwium nie będzie pytań dotyczących obliczania liczby atomów węgla w cząsteczce na podstawie widma MS.

Umieć:

- alifatycznych dla związków alifatycznych (-29, - 57, itp.)
- rozpady dla związków aromatycznych, jon tropyliowy i jego rozpad (kiedy jest, kiedy go brak)
- rozpad α ,
- przegrupowanie McLafferty’ego,
- efekt orto
- rozpad alkoholi (jon oksoniowy, rozpad α)
- rozpad fenoli (– CO, – CHO)
- rozpad aldehydów i ketonów (rozpad α , przegrupowanie McLafferty’ego)
- rozpad kwasów organicznych
- rozpad amin

UV VIS

λ_{\max} dla benzenu ~ 250 nm

pojęcia: auksochrom, chromofor, przesunięcie batochromowe, przesunięcie hipsochromowe

IR

Obowiązuje umiejętność opisu drgań podanych poniżej wiązań.

O – H (alkohole, fenole, kwasy karboksylowe), C = O, N – H (w aminach pierwszo i drugorzędowych),

C – H (alifatyczne, aromatyczne, w grupie CHO), C = C,

Opis musi zawierać:

- wiązanie (np. N – H, C – H alifatyczne, C – H aromatyczne)
- wartość liczby falowej z jednostką (z zakresu 4000-1500cm⁻¹)
- w pewnych wypadkach kształt pasma (np. podwójne pasmo, szerokie pasmo)
- rodzaj drgań (rozciągające, deformacyjne)

np. dla C = O: ~1700cm⁻¹ pasmo drgań rozciągających

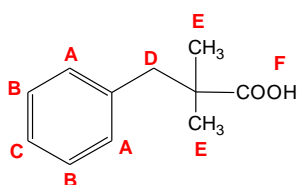
dla N – H w grupie NH₂: ~3500cm⁻¹ podwójne pasmo drgań rozciągających, któremu towarzyszy pasmo drgań deformacyjnych ~1600cm⁻¹

NMR

Dla każdego narysowanego wzoru związku zaznaczyć nierównocenne grupy protonów i węgla. Dla protonów podać przewidywaną multipletowość sygnałów.

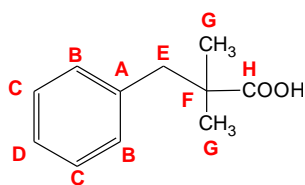
Poniżej podano sposób zaznaczania we wzorach protonów i węgla. Interpretacje należy przedstawić w tabeli na przykład takiej jak podano poniżej. Podając wartości δ wystarczy podać wartość nie uwzględniającą wpływu sąsiadujących grup. Np. dla wodoru oznaczonego jako D można podać wartość ~1ppm nie uwzględniając obecności pierścienia i grupy COOH.

¹H NMR



proton	przybliżona wartość δ [ppm]	multipletowość	liczba protonów
A	~7	dublet	2H
B		tryplet	2H
C		tryplet	1H
D	~1	singlet	2H
E	~1	singlet	6H
F	~11	singlet	1H

¹³C NMR



węgiel	wartość δ odczytana z widma [ppm]
A	~130
B	
C	
D	
E	~40
F	
G	
H	~180

Należy znać przybliżone położenie sygnałów NMR (w nawiasach podano wymagane wartości) dla:

protonów:

aromatycznych (6 – 8 ppm)

niepodstawionych związków alifatycznych (około 1 ppm)

aldehdowych (około 9 ppm)

kwasowych (około 11 ppm)

fenole (4 – 8 ppm)

aminy (alifatyczne: 0,5 – 3,5 ppm; aromatyczne: 3 – 5 ppm)

amidy (5,5 – 9 ppm)

dla węgla:

alifatycznych (~40 ppm)

aromatycznych (~120 ppm)

z grup karboksylowych (~180 ppm)

z karbonylowych (~200 ppm)

Przewidzieć wpływ odsłaniający i przesłaniający podstawników w pierścieniu.

(wpływ odsłaniający – podstawniki dezaktywujące (NO₂, COOH, CHO, COR, Cl, Br)

(wpływ przesłaniający – podstawniki aktywujące (OH, OR, NH₂, NHR, NR₂, R, Ar)