

## Lista 7. Spektroskopia jądrowego rezonansu magnetycznego

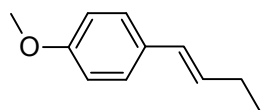
1. Ile rodzajów nierównocennych atomów wodoru, a ile atomów węgla występuje w następujących związkach?

- a) toluen                                      b) 2-metylo-1-buten                                      c) bromoetan  
d) 1,1-dimetylcykloheksan                      e) eter butylowo-metylowy                                      f) *cis*-2-penten

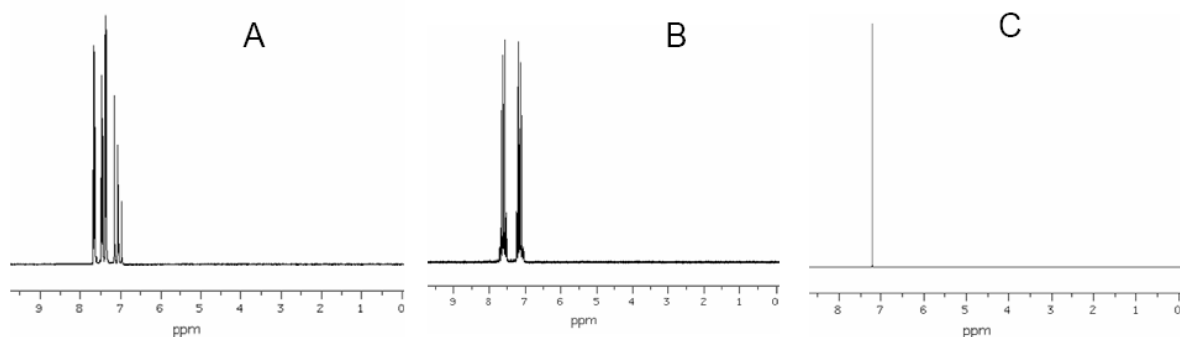
2. Ilu i jakich sygnałów należy spodziewać się na widmach  $^1\text{H}$  NMR poniższych związków? Należy podać multipletowości i relatywne intensywności integralne.

- a)  $\text{CH}_3\text{CHCl}_2$                       b)  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CO}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$                       c)  $(\text{CH}_3)_3\text{CCH}_2\text{CH}_3$                       d)  $\text{ClCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$

3. Proszę zidentyfikować różne atomy wodoru oraz węgla w podanej cząsteczce i wskazać, w jakich obszarach widm  $^1\text{H}$  NMR oraz  $^{13}\text{C}$  NMR powinny znaleźć się sygnały:



4. Poniższe widma  $^1\text{H}$  NMR odpowiadają trzem różnym izomerom dibromobenzenu. Proszę przypisać właściwe struktury poszczególnym widmom i uzasadnić wybór.

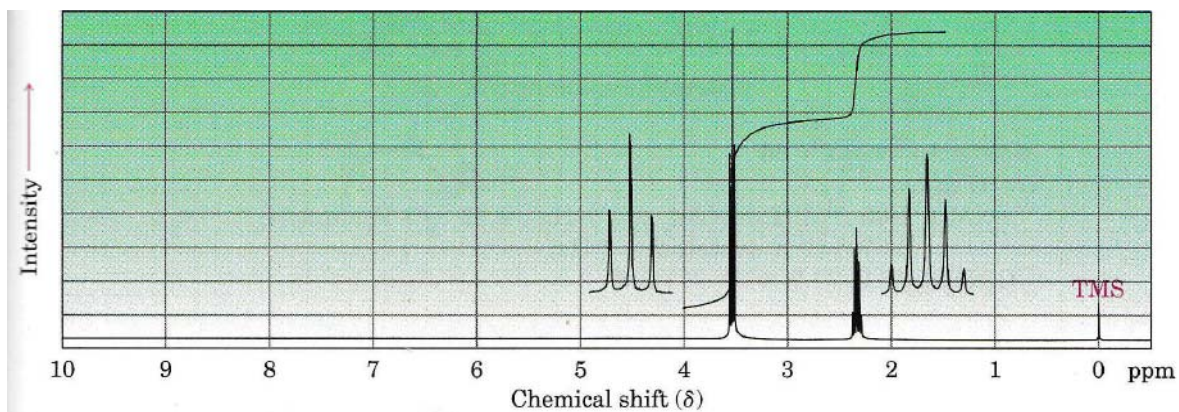


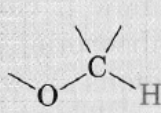
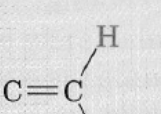
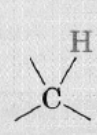
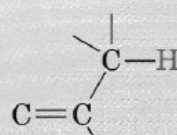
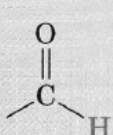
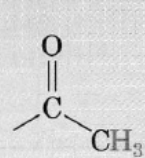
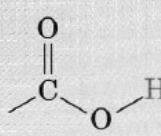
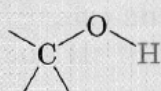
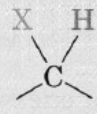
Ilu sygnałów powinno pojawić się na widmach  $^{13}\text{C}$  NMR dla powyższych izomerów?

5. Jak, za pomocą spektroskopii  $^{13}\text{C}$  NMR odróżnić poszczególne pary izomerycznych związków?

- a)  $(\text{CH}_3)_3\text{N}$  i  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_3$ ,  
b)  $\text{CH}_3\text{COCH}_3$  i  $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{OH}$   
c)  $\text{CH}_3\text{COCH}_3$  i  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$

6\*. Poniżej zamieszczono widmo  $^1\text{H}$  NMR związku o wzorze sumarycznym  $\text{C}_3\text{H}_6\text{Br}_2$ . Proszę zaproponować strukturę związku i uzasadnić wybór.



Type of hydrogen		Chemical shift ( $\delta$ )	Type of hydrogen	Chemical shift ( $\delta$ )
Reference	$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	0	Alcohol, ether	 3.3–4.0
Saturated primary	$-\text{CH}_3$	0.7–1.3	Alkynyl	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ 2.5–2.7
Saturated secondary	$-\text{CH}_2-$	1.2–1.4	Vinylic	 5.0–6.5
Saturated tertiary	 1.4–1.7	1.4–1.7	Aromatic	$\text{Ar}-\text{H}$ 6.5–8.0
Allylic	 1.6–2.2	1.6–2.2	Aldehyde	 9.7–10.0
Methyl ketone	 2.1–2.4	2.1–2.4	Carboxylic acid	 11.0–12.0
Aromatic methyl	$\text{Ar}-\text{CH}_3$	2.5–2.7	Alcohol	 2.5–5.0 (Variable)
Alkyl halide X = Cl, Br, I	 2.5–4.0	2.5–4.0		

Type of carbon	Chemical shift $\delta$ (ppm)
Primary alkyl, $\text{RCH}_3$	5–20
Secondary alkyl, $\text{RCH}_2\text{R}'$	20–30
Tertiary alkyl, $\text{R}_3\text{CH}$	30–50
Quaternary alkyl, $\text{R}_4\text{C}$	30–45
Allylic, $\text{R}_2\text{C}=\underset{\text{R}''}{\text{C}}\text{CH}_2\text{R}'$	20–40
Chloroalkane, $\text{RCH}_2\text{Cl}$	25–50
Bromoalkane, $\text{RCH}_2\text{Br}$	20–40
Ether or alcohol, $\text{RCH}_2\text{OR}'$ or $\text{RCH}_2\text{OH}$	50–90
Carboxylic acids, $\text{RCOOH}$	170–180
Aldehyde or ketone, $\text{RCH}=\overset{\text{O}}{\parallel}$ or $\text{RCR}'=\overset{\text{O}}{\parallel}$	190–210
Alkene, aromatic, $\text{R}_2\text{C}=\text{CR}_2$	100–160
Alkyne, $\text{RC}\equiv\text{CR}$	65–95