

## Interpretacja widm 1 - 2017

### Zadanie 1.

Obliczyć przesunięcia chemiczne dla sygnałów w widmie  $^1\text{H}$  NMR benzenu, jeżeli widmo rejestrowano za pomocą:

- aparatu 300 MHz i wiadomo, że częstotliwość rezonansowa dla protonów benzenu wynosi 2181 Hz
- aparatu 60 MHz i wiadomo, że częstotliwość rezonansowa dla protonów benzenu wynosi 436 Hz.

### Zadanie 2

Ilu sygnałów w widmie  $^1\text{H}$  NMR spodziewamy się dla następujących substancji:

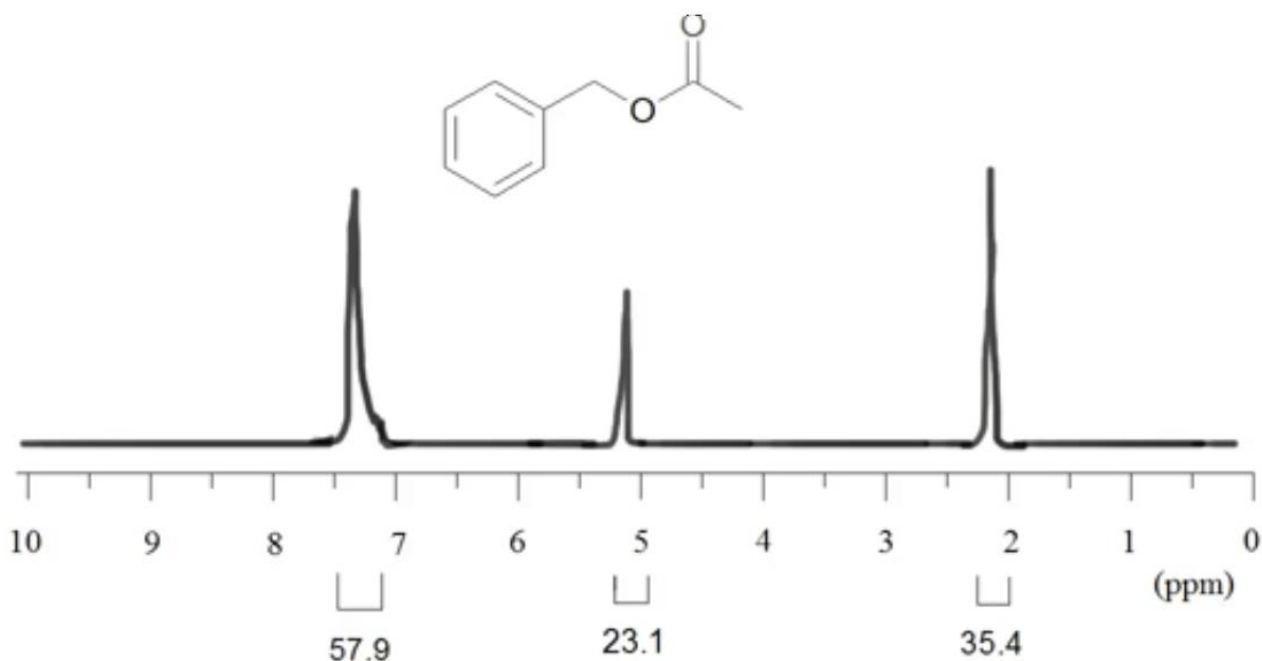
- 1-bromobutan, b) 1-butanol, c) n-butan, d) 1,4-dibromobutan, e) 2,2-dibromobutan, f) 2,2,3,3-tetrabromobutan, g) 1,1,4-tribromobutan, h) 1,1,1-tribromobutan, i) 1,1-dibromoeten, j) *cis*-1,2-dibromoeten, k) *trans*-1,2-dibromoeten, l) bromek winylu, m) bromek allilu, n) 2-metylo-2-buten, o) eter dietylowy, p) 1,4-dietylobenzen, q) keton metyloowo-winylowy.

### Zadanie 3

Obliczyć stopień nienasylenia dla następujących substancji: heksan, heksen, cykloheksan, benzen, fenol, anilina, kwas cynamonowy.  $S = (2N_C - N_H + N_N - N_X + 2)/2$ , gdzie  $N_C$  – liczba at. C,  $N_H$  – liczba at. H,  $N_N$  – liczba at. N,  $N_X$  – liczba at. fluorowca.

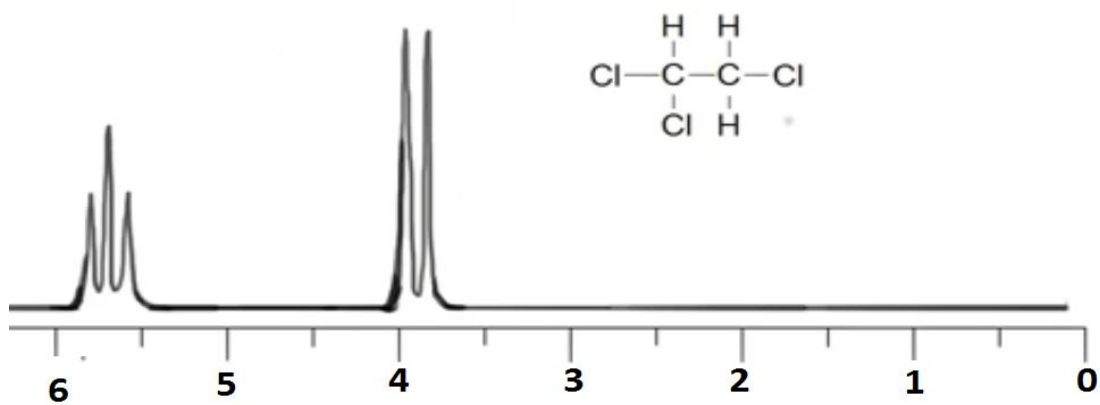
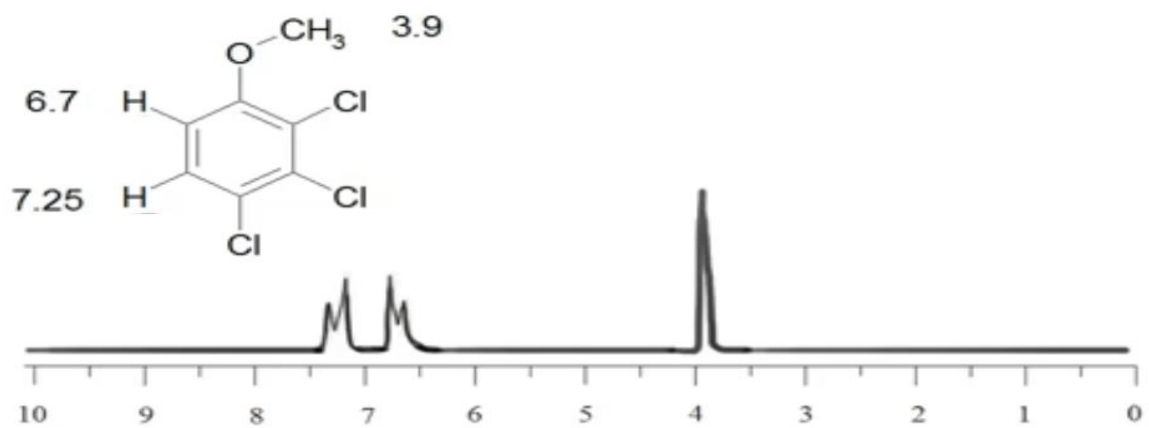
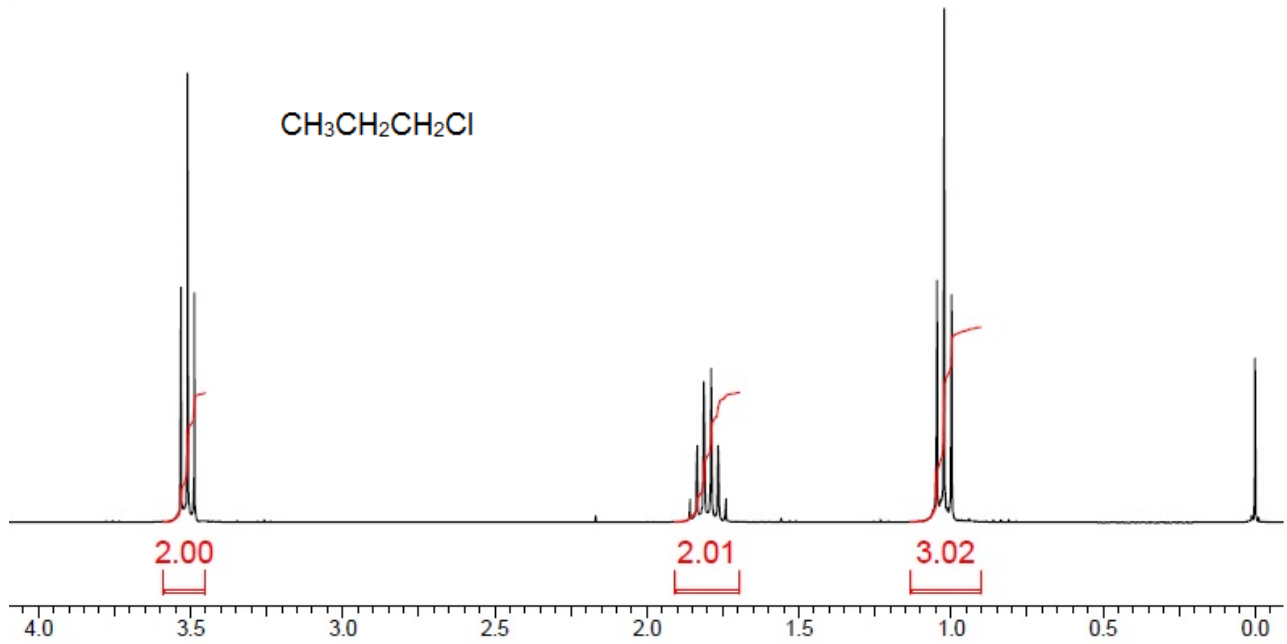
### Zadanie 4

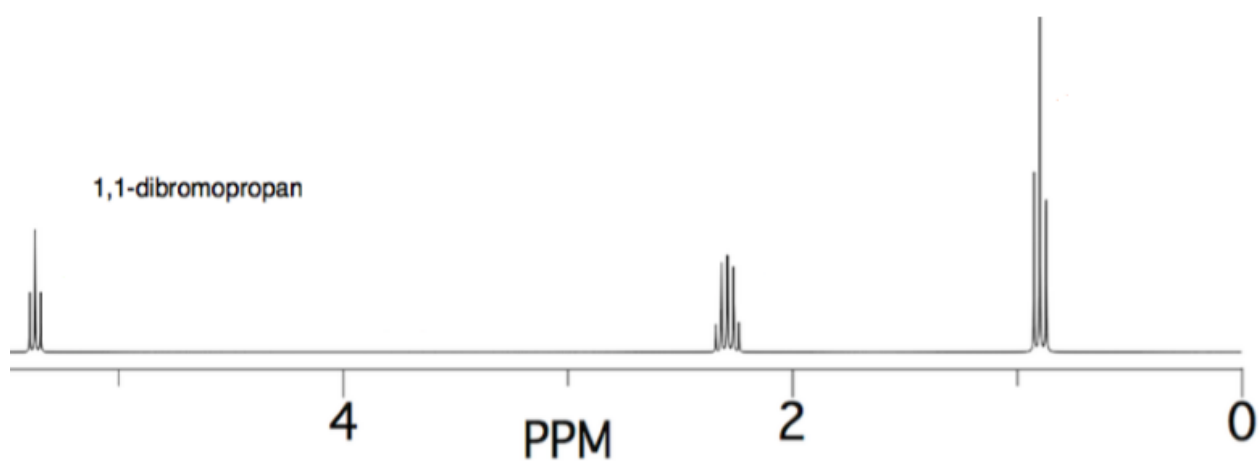
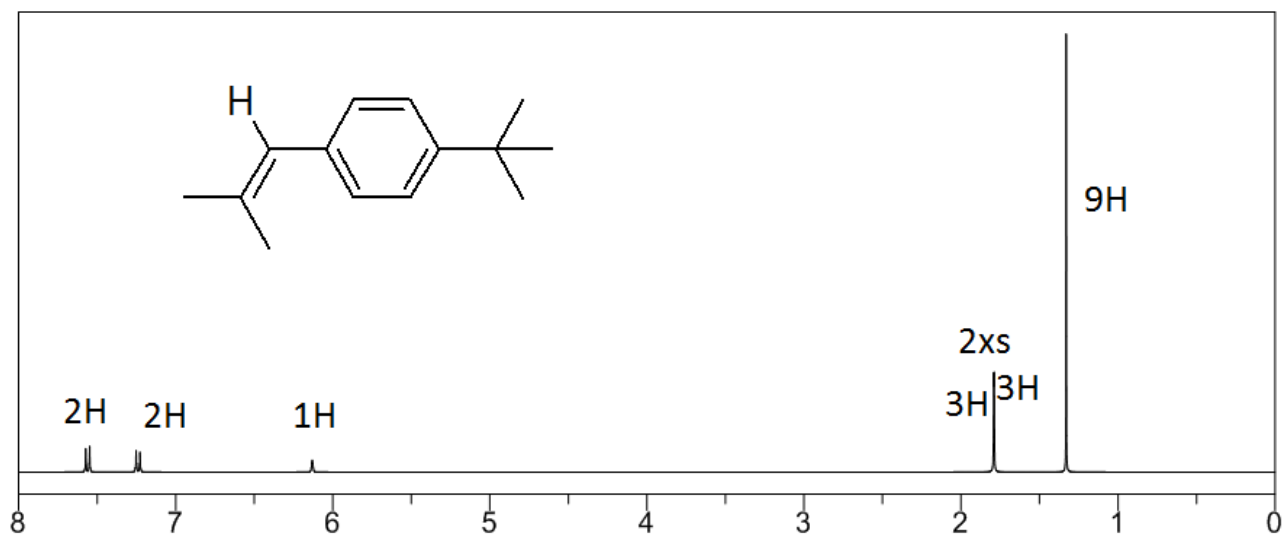
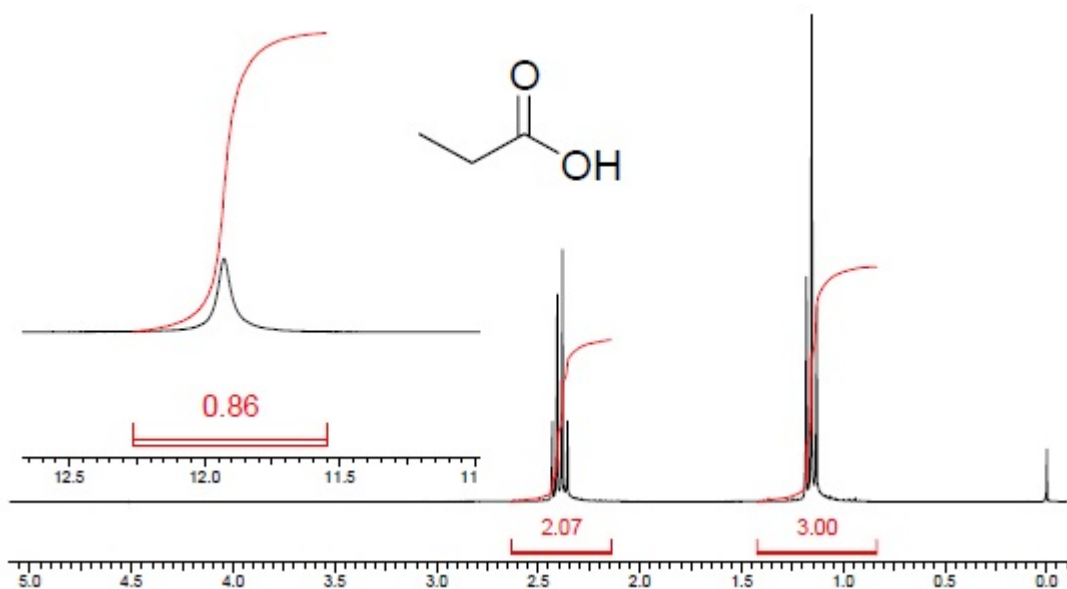
Zinterpretować podane poniżej widmo

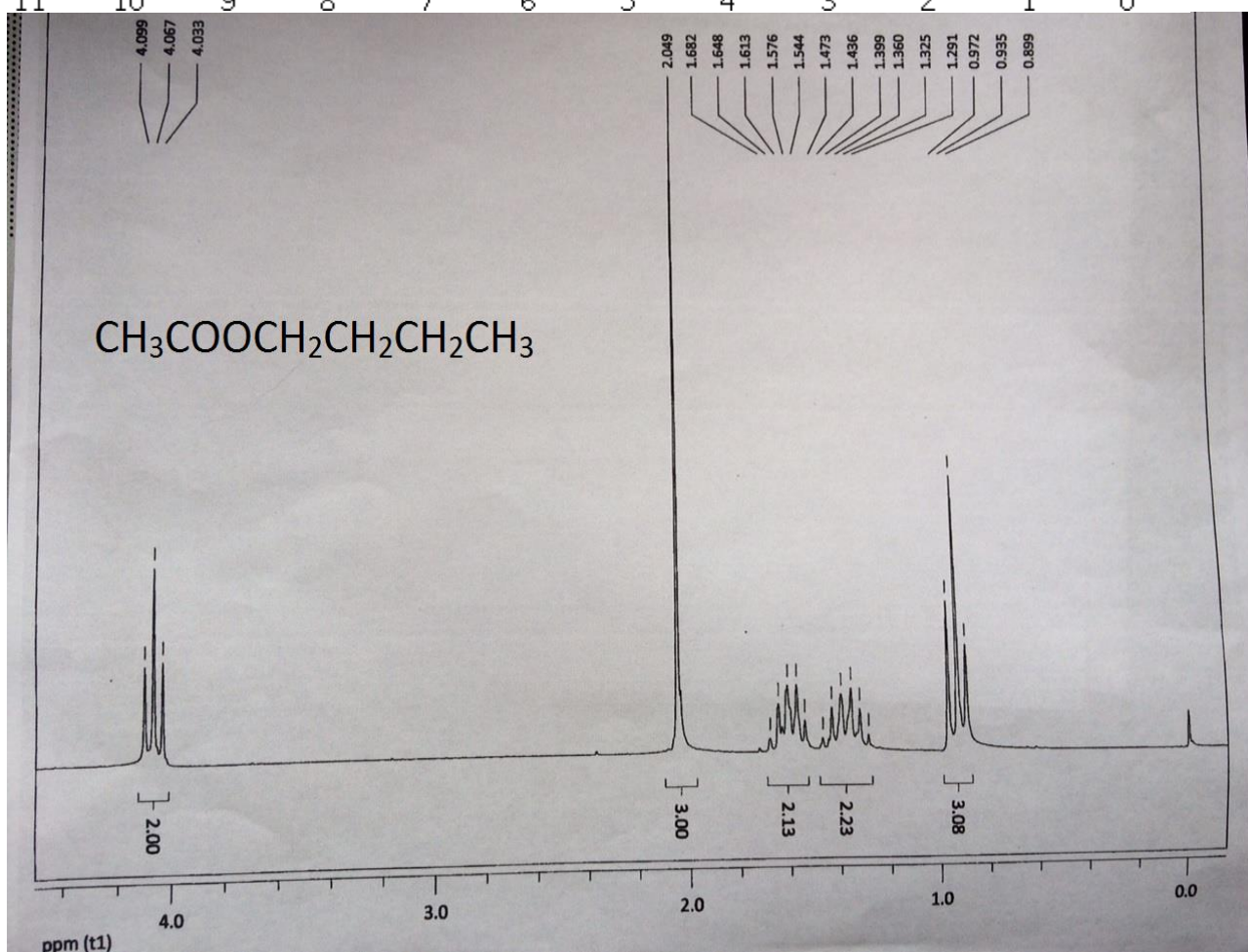
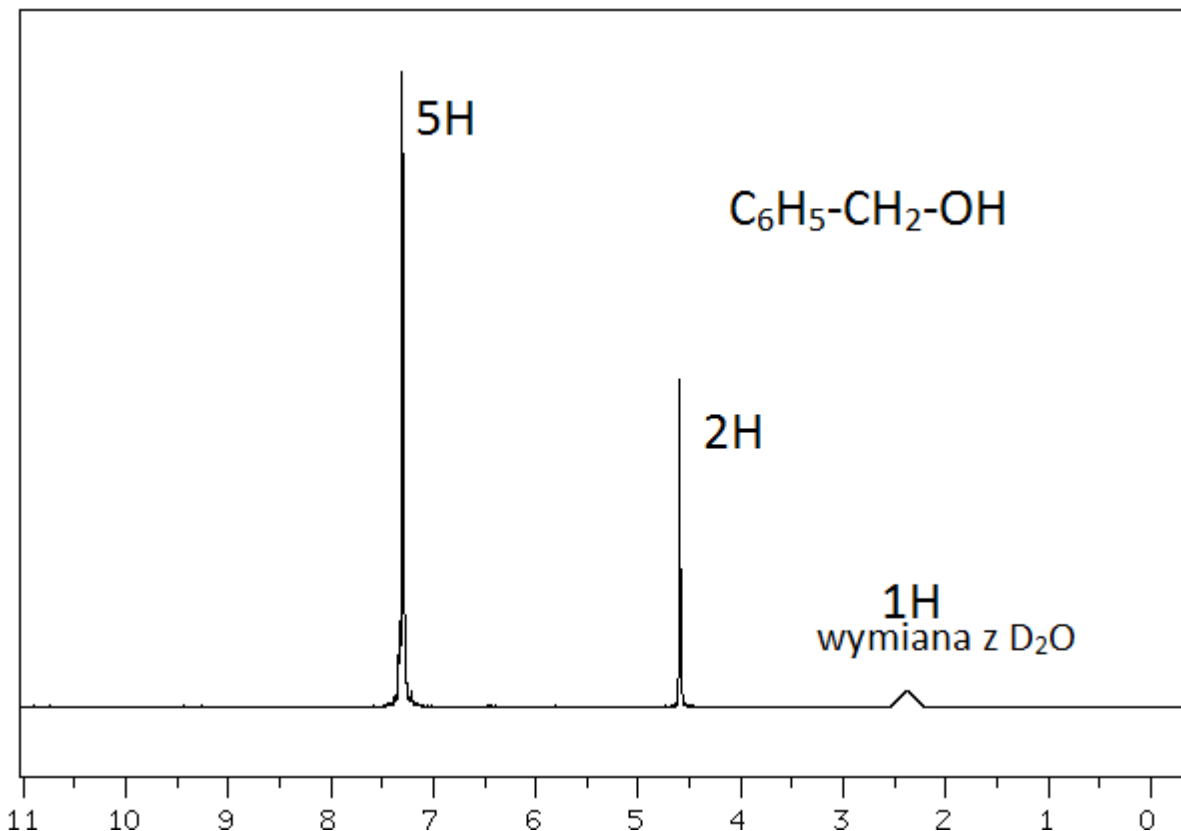


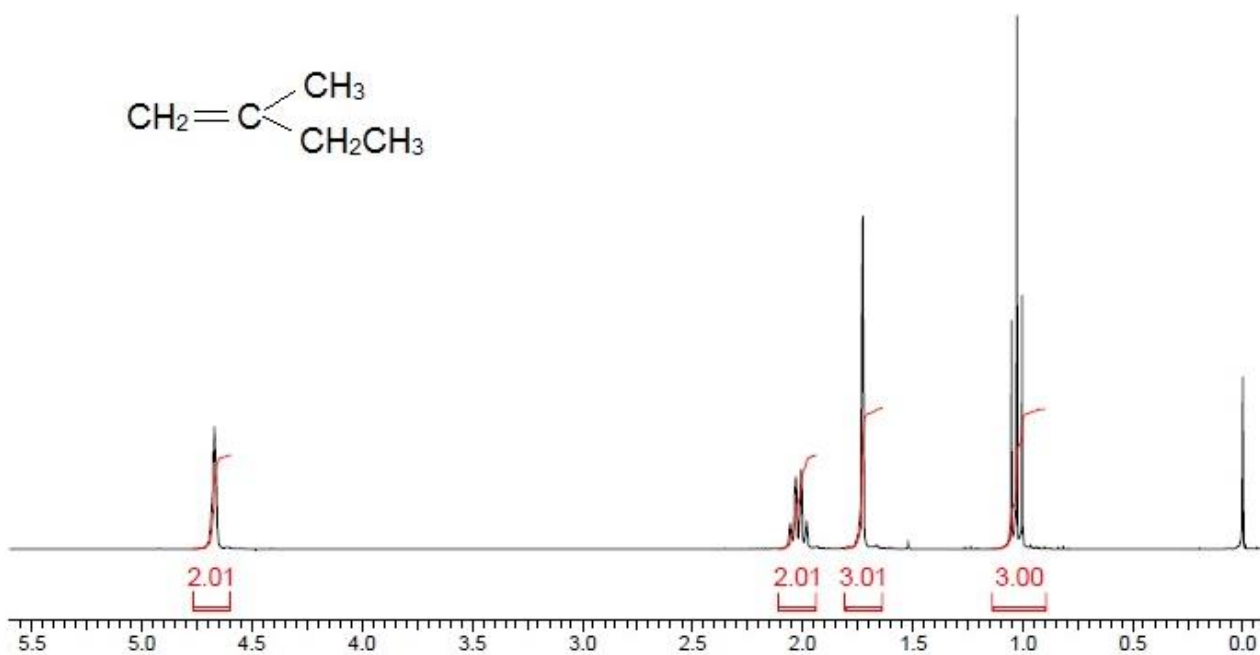
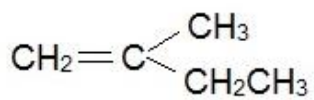
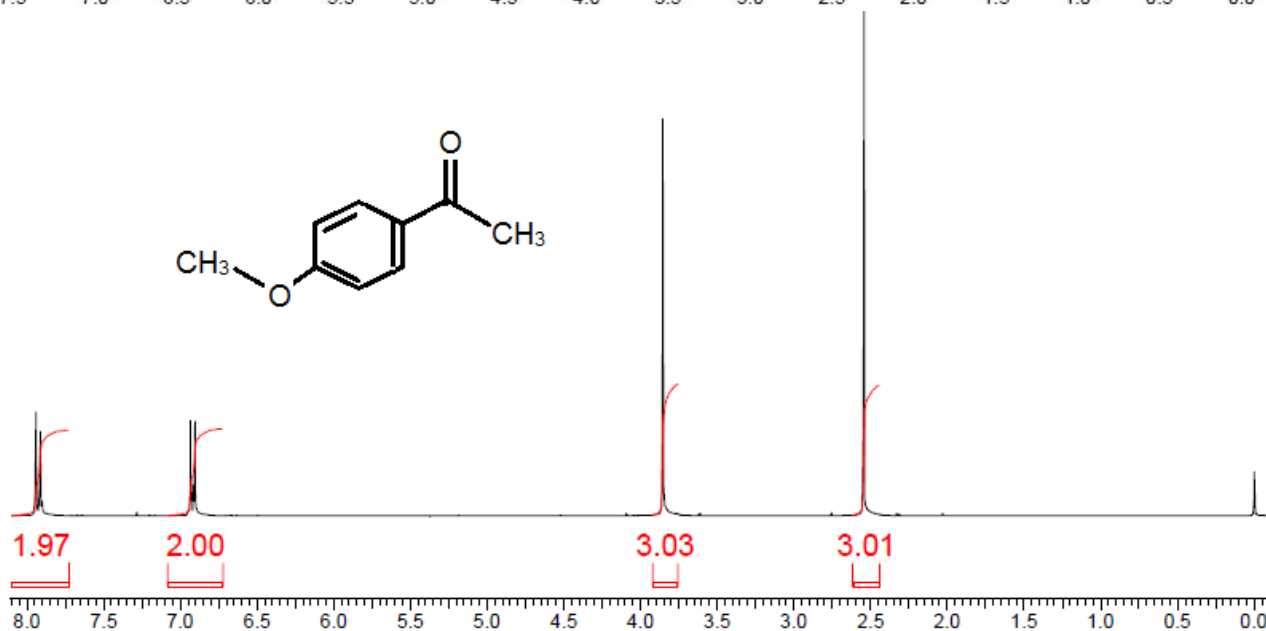
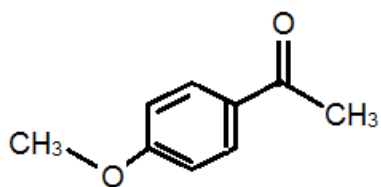
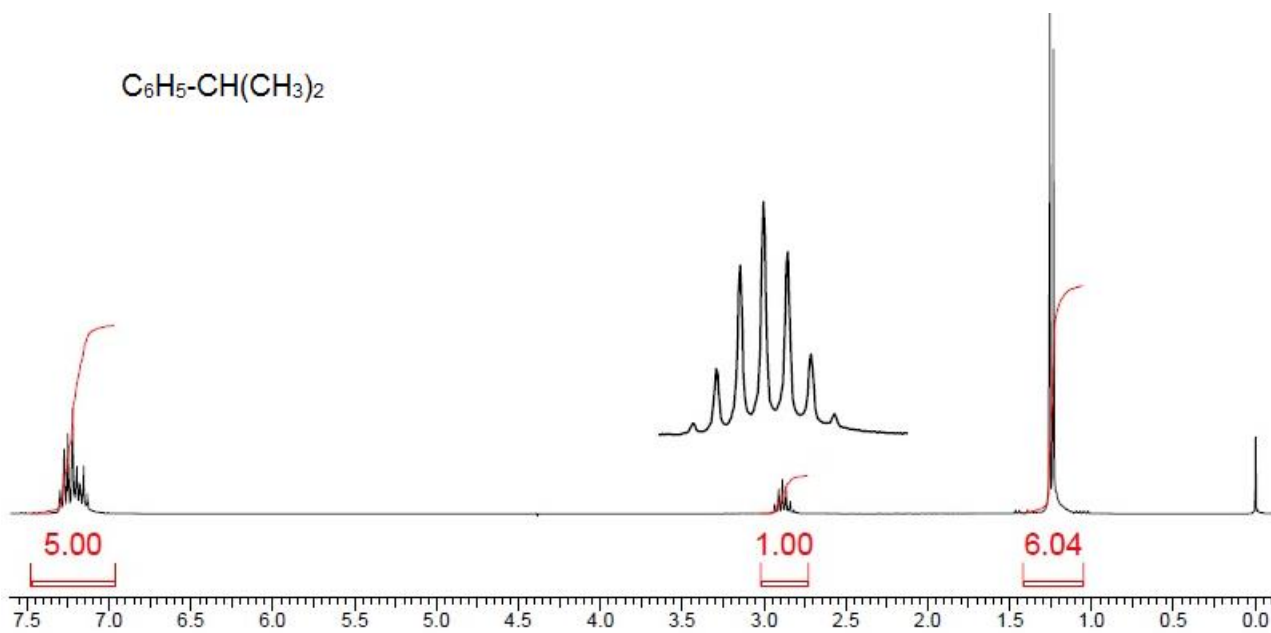
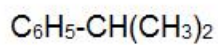
### Zadanie 5

Wyjaśnić położenie i multipletowość sygnałów poniższych widm  $^1\text{H}$  NMR:







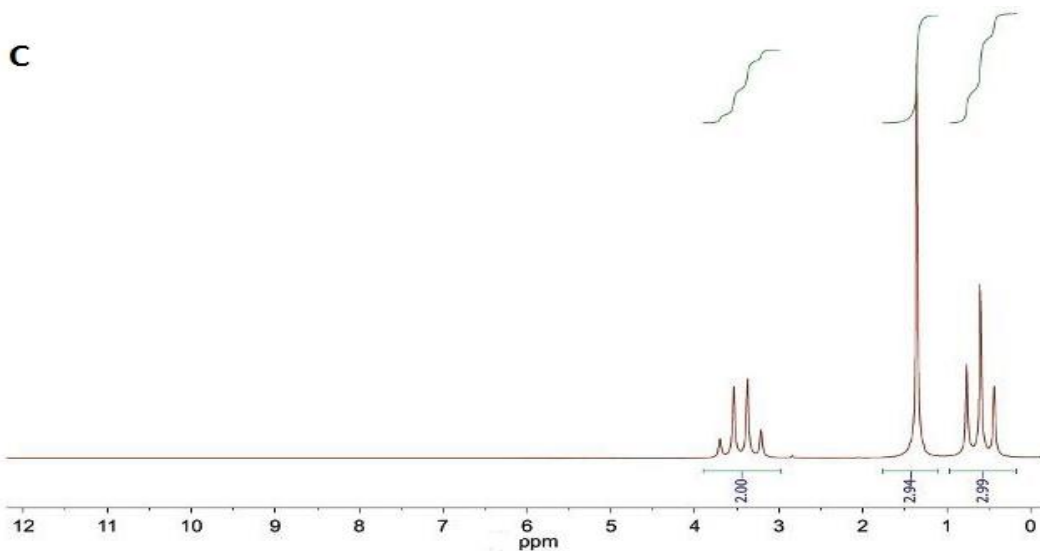
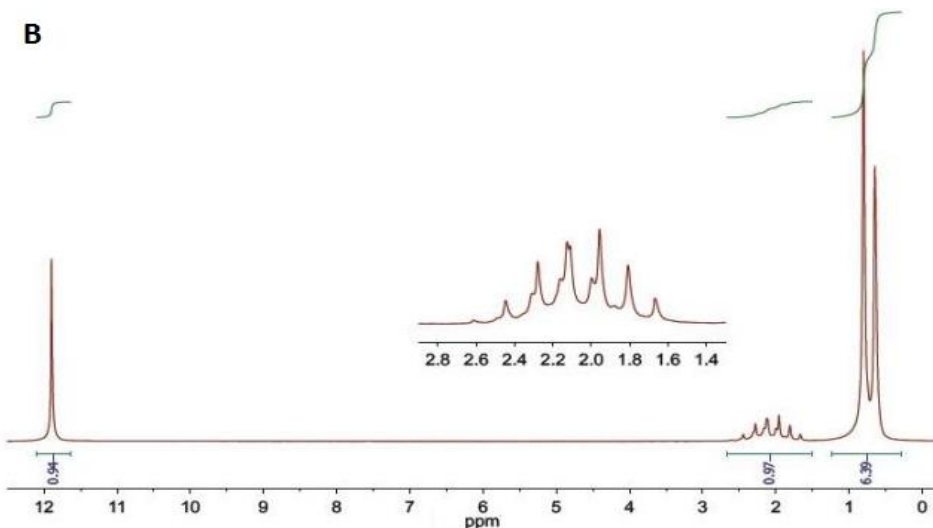
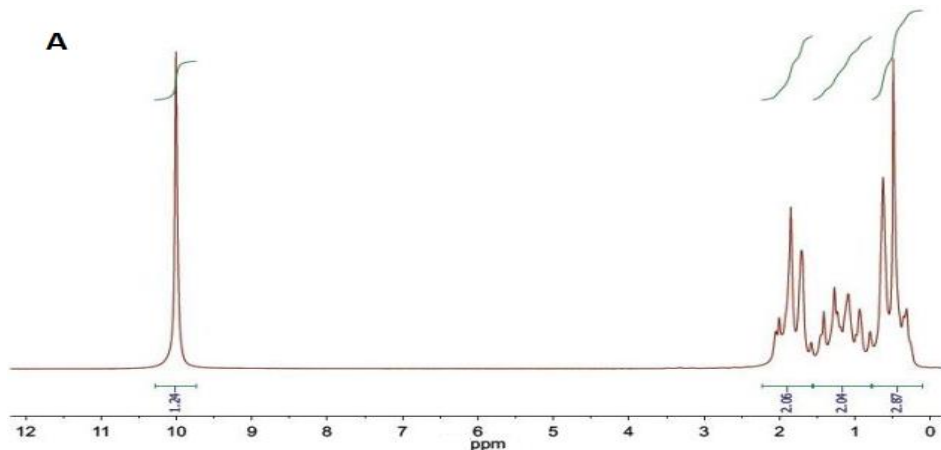


### Zadanie 6

Z jakich sygnałów będą składały się widma substancji: Propionian etylu, benzoesan n-propylu, mrówczan n-butylu, benzoesan izopropylu, tert-butylobenzen, 1,4-dimetylobenzen, 2-nitropropan?

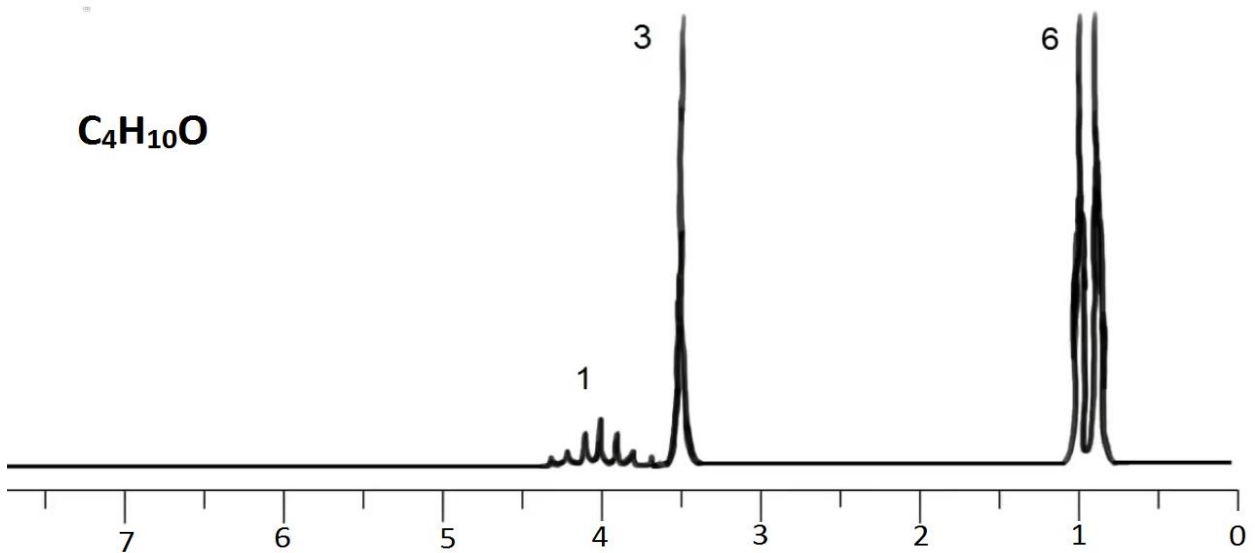
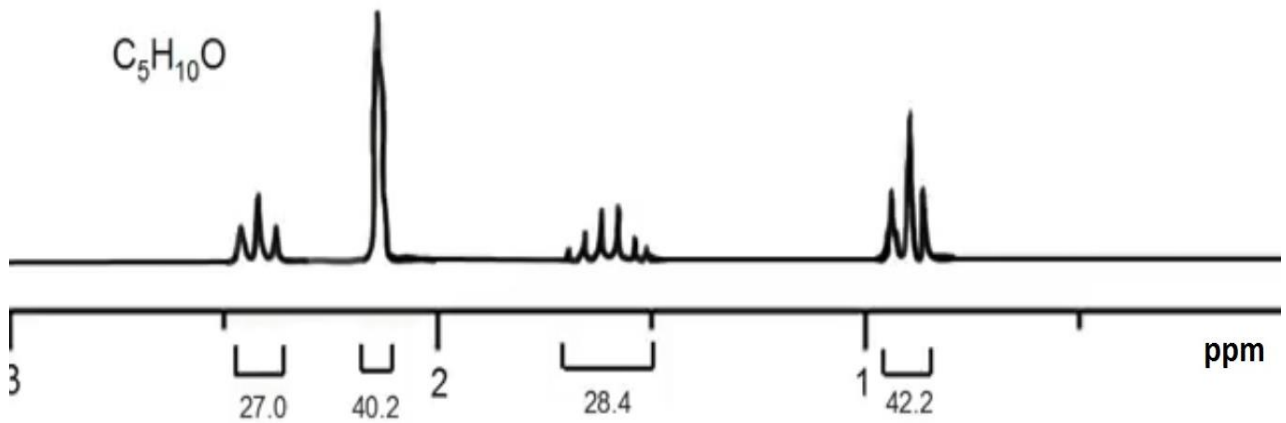
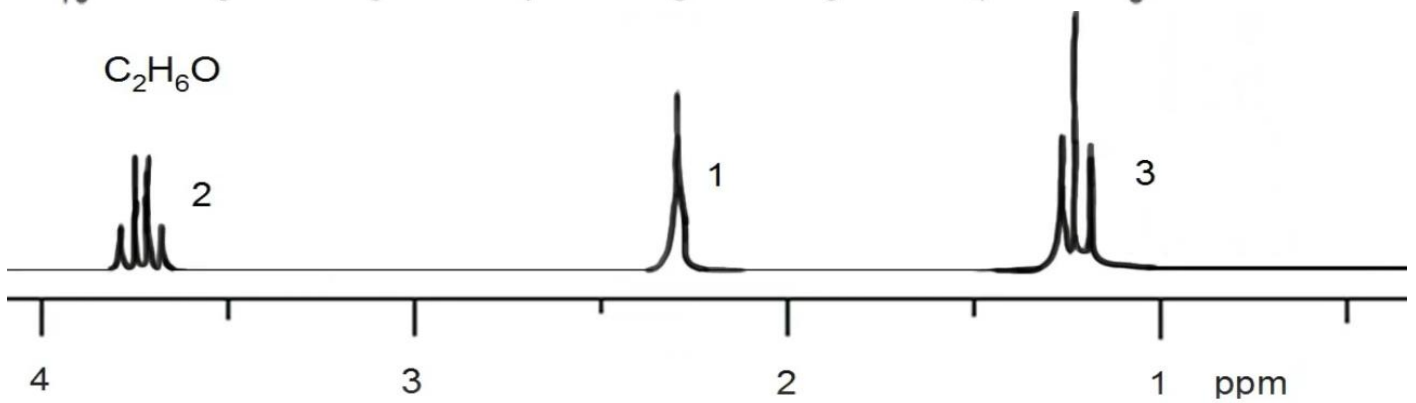
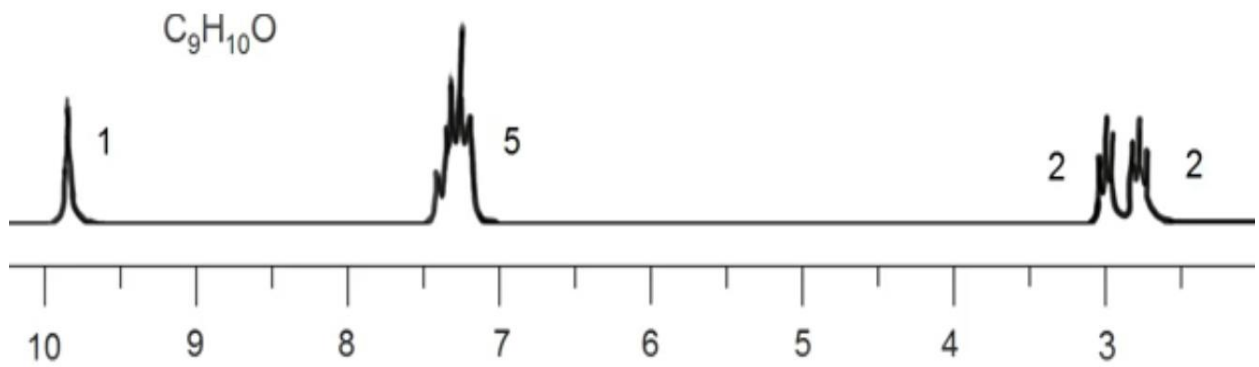
### Zadanie 7

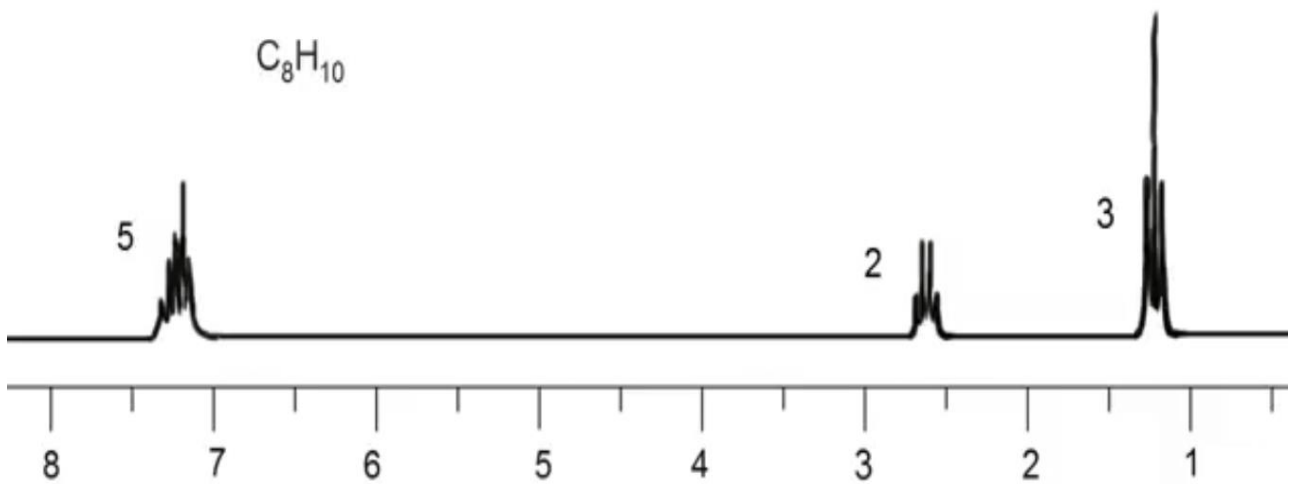
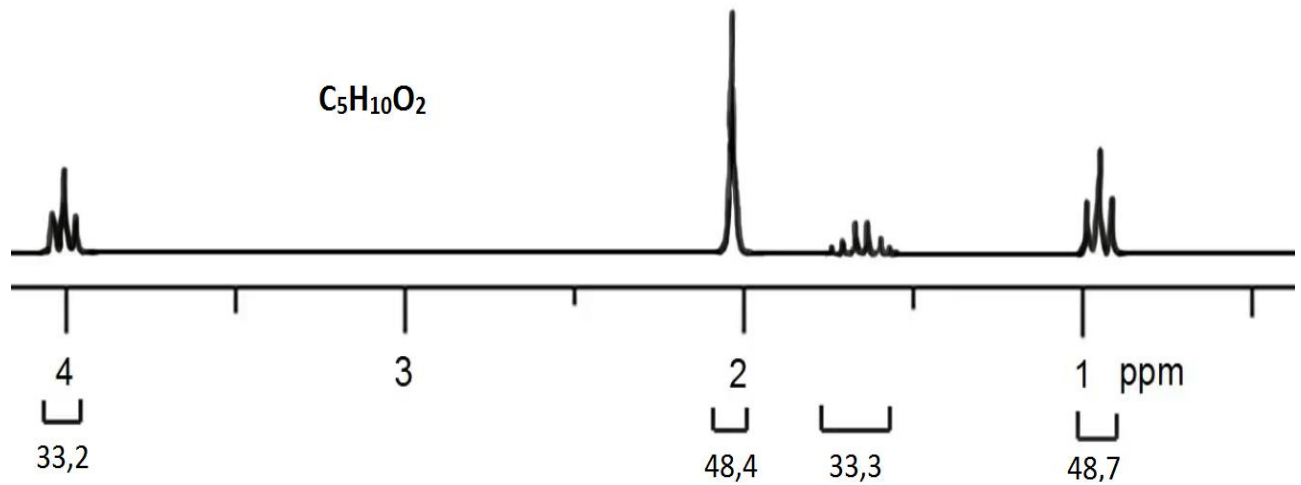
Poniżej ukazane są widma  $^1\text{H}$  NMR następujących substancji:  $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ ,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ ,  $(\text{CH}_3)_2\text{CHCOOH}$ . Przypisać odpowiednie widma poszczególnym strukturom i uzasadnić.



### Zadanie 8

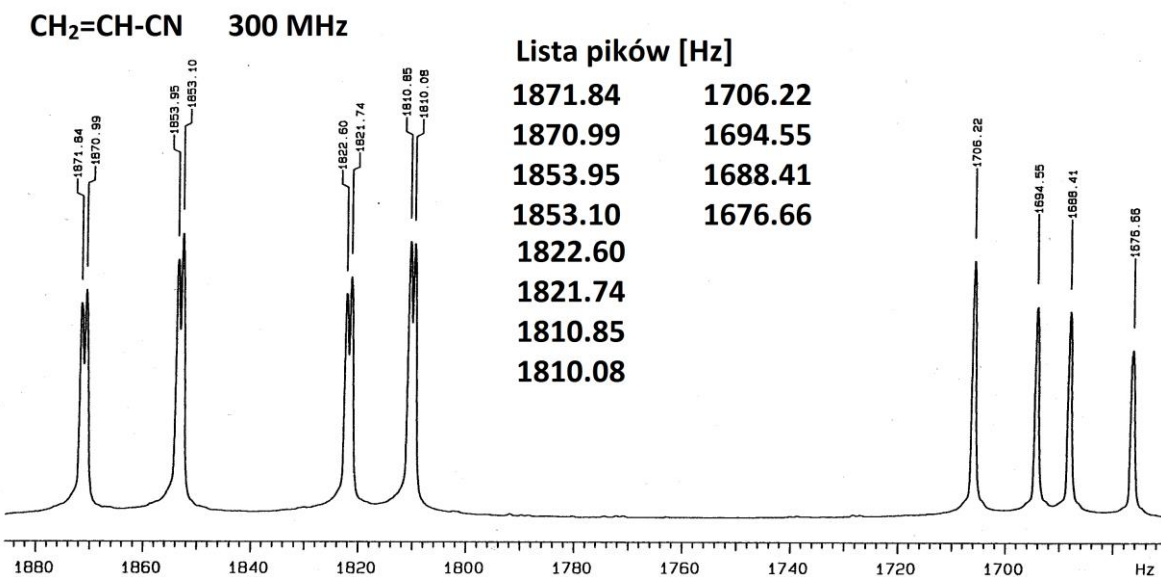
Zaproponować struktury substancji, których widma  $^1\text{H}$  NMR pokazano poniżej





### Zadanie 9

Obliczyć przesunięcia chemiczne protonów, wyjaśnić multipletowość, wyznaczyć stałe sprzężenia i przypisać sygnały odpowiednim atomom H w cząsteczce akrylonitrylu, którego widmo  $^1H$  NMR pokazane jest poniżej:  $J^{H-H}_{gem} = 0 \div 4$  Hz;  $J^{H-H}_{cis} = 6 \div 14$  Hz;  $J^{H-H}_{trans} = 11 \div 18$  Hz

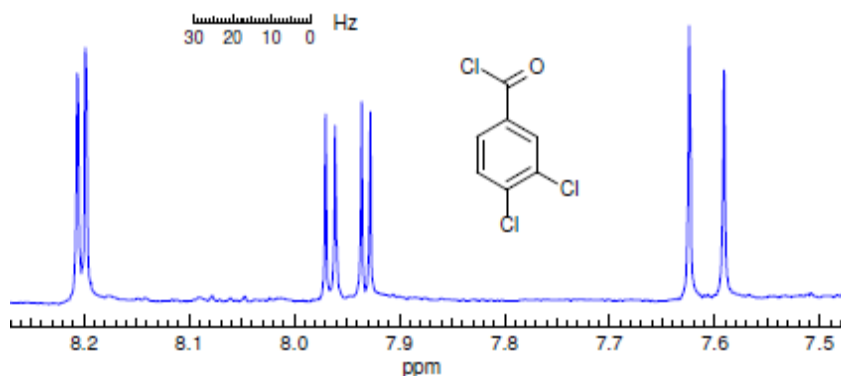




### Zadanie 10

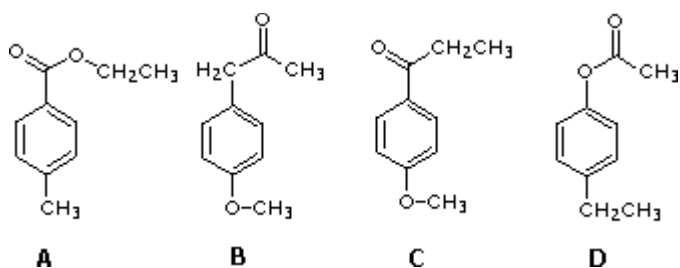
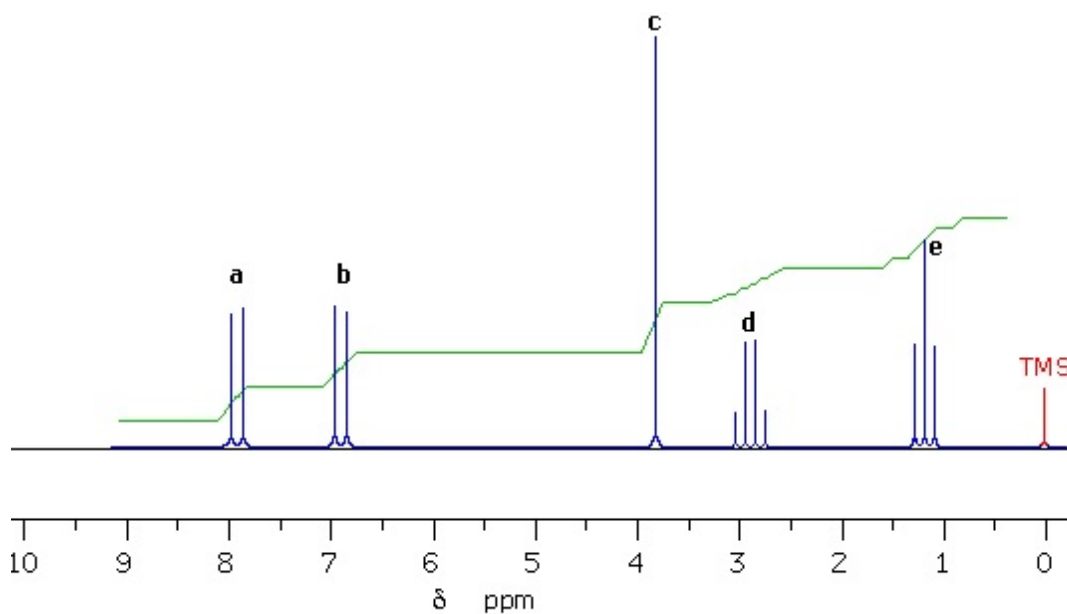
Wyjaśnić multipletowość, wyznaczyć stałe sprzężenia i przypisać sygnały odpowiednim atomom H w cząsteczce chlorku kwasowego, którego widmo  $^1\text{H}$  NMR pokazane jest poniżej:

$J^{\text{H-H}}_{\text{orto}} = 7 \div 10 \text{ Hz}$ ;  $J^{\text{H-H}}_{\text{meta}} = 2 \div 3 \text{ Hz}$ ,  $J^{\text{H-H}}_{\text{para}} = 0 \div 1 \text{ Hz}$



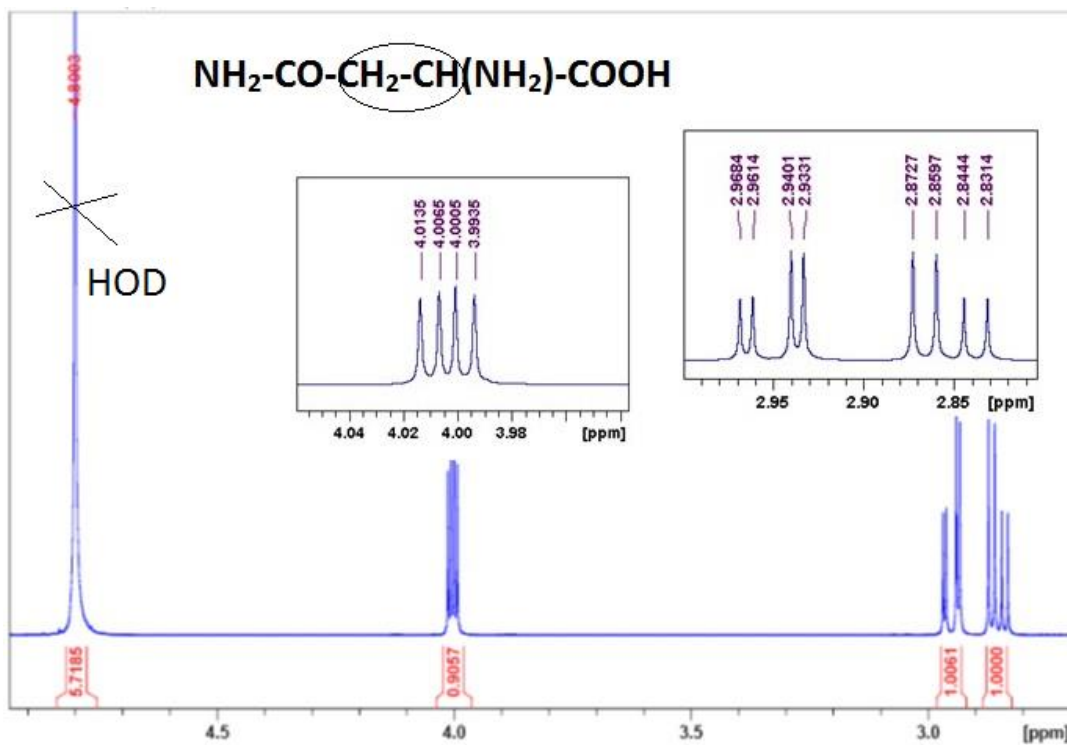
### Zadanie 11

Która z poniższych struktur odpowiada podanemu widmu? Odpowiedź uzasadnić.



### Zadanie 12

Poniżej przedstawiono widmo fragmentu cząsteczki asparaginy. Wyjaśnić liczbę, multipletowość i położenie widocznych sygnałów.



### Zadanie 13

Substancja o wzorze C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>ClBr daje widmo <sup>1</sup>H NMR, składające się z dwóch dubletów o jednakowej integracji i stałej sprzężenia 16 Hz. Substancja ta to (odpowiedź uzasadnić):

A) (Z)-1-bromo-2-chloroeten

B) (E)-1-bromo-2-chloroeten

C) 1-bromo-1-chloroeten

$J_{\text{gem}}^{\text{H-H}} = 0 \div 4 \text{ Hz}$ ;  $J_{\text{cis}}^{\text{H-H}} = 6 \div 14 \text{ Hz}$ ;  $J_{\text{trans}}^{\text{H-H}} = 11 \div 18 \text{ Hz}$