**Praktikos darbas „Spektrų nagrinėjimas naudojantis pateikta informacija”**

Naudodamiesi lentelėse pateikta informacija išnagrinėkite dviejų duotų cheminių junginių spektrus ir priskirkite kiekvieną spektrą atitinkamam junginiui.

**IR, Masės ir 1H-NMR spektroskopijos užduotys[[1]](#footnote-1)**

Šiuose spektruose nustatykite:

* Cheminius ryšius IR spektre
* Molekulės masę, pagal molekulinio jono fragmentą.
* Vandenilio protonų aplinkas 1H-NMR spektruose

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | **Spektrai** | **Analizė** |
| **1** |  | Cheminiai ryšiai  Smailių skaičius, vandenilių sk., cheminis poslinkis  Molekulinio jono masė |
| **2** |  | Cheminiai ryšiai  Molekulinio jono masė  Smailių skaičius, vandenilių sk., cheminis poslinkis |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **3** |  | Cheminiai ryšiai  Smailių skaičius, vandenilių sk., cheminis poslinkis  Molekulinio jono masė |

Priedas

1H BMR spektroskopija. Protonų cheminiai poslinkiai įvairiose grupėse. R=alkilo grupė

|  |  |
| --- | --- |
| **Protono padėtis molekulėje** | **Cheminis poslinkis** |
| R-CH3 | 0,7-1,3 |
| R-OH | 1,0-5,0 |
| R-CH2-R | 1,2-1,4 |
| RO-CH3  *R = H arba alkilo grupei* | 3,2-3,8 |
| R-CHO | 9,0-10,0 |
| R-COOH | 11,0-12,0 |

[NMR Chemical Shift Values Table - Chemistry Steps](https://www.chemistrysteps.com/nmr-chemical-shift-values-table/)

Infraraudonasis spektras. Cheminių ryšių virpesių sritys[[2]](#footnote-2)

|  |  |
| --- | --- |
| **Cheminis ryšys** | **Bangos skaičius 1/cm** |
| O-H (alkoholiuose) | 3600-3200 |
| C-H | 3100-2800 |
| O-H (karboksirūgštyse) | 3000-2500 |
| C=O (aldehiduose, ketonuose, karboksirūgštyse) | 1750-1710 |
| C-O (alkoholiuose) | 1400-1050 |

Masių spektroskopijos duomenys. Molekulių fragmentų masės[[3]](#footnote-3)

|  |  |
| --- | --- |
| **Galimas fragmentas** | **Masė** |
| CH2 | 14 |
| CH3 | 15 |
| OH | 17 |
| C2H5 | 29 |
| COOH | 45 |

Atsakymai: 1 junginys – Propanonas; 2 junginys – propano rūgštys; 3 junginys – 2-propanolis

1. [Animated Spectra (ohio-state.edu)](https://cbc-uged.asc.ohio-state.edu/anim_spectra/index.html) [↑](#footnote-ref-1)
2. Duomenys paimti iš D. Mickevičius Cheminės analizės metodai, Vilnius 1998. [↑](#footnote-ref-2)
3. Duomenys paimti iš D. Mickevičius Cheminės analizės metodai, Vilnius 1998. [↑](#footnote-ref-3)