

CACH2 – zápočtový test 2 - řešení

1) Z NMR spektra jsou patrné 3 funkční skupiny, CH₃, CH₂ a CH, přičemž CH₃ a CH₂ jsou přímo spojeny kovalentní vazbou, o čemž svědčí multiplicita signálů (triplet, resp. kvartet). Posun CH₂ skupiny (2,5 ppm) svědčí o vazbě na skupinu C=X. Posun CH skupiny (9 ppm) svědčí o přítomnosti aldehydické skupiny (CHO). Tento aldehydický vodík štěpí s velmi malou interakční konstantou, proto není ve spektru patrné štěpení CH a CH₂ skupiny, ačkoli jsou spolu přímo spojeny kovalentní vazbou. Analyzovaná látka je tedy propanal.

Z IČ spektra můžeme odečíst pásy příslušející valenčním vibracím C-H skupin CH₃ a CH₂ (2980, 2942 a 2897 cm⁻¹) a aldehydové CHO (2825 a 2726 cm⁻¹), valenční vibraci C=O skupiny (1731 cm⁻¹), deformační vibraci CH₃ a CH₂ skupiny (1464 cm⁻¹) a symetrickou deformační „deštníkovou“ vibraci CH₃ skupiny (1393 cm⁻¹), což potvrzuje výše uvedenou strukturu.

2) Z MS spektra (a) lze podle silného signálu molekulového píku ($m/z = 112$) usoudit na aromatický systém. Podle přítomnosti signálu $m/z=114$ o třetinové intenzitě vůči $m/z=112$ můžeme usoudit na přítomnost jednoho atomu chlóru. Odštěpením chlóru vzniká fragment odpovídající samotnému aromatickému skeletu, zde $112 - 35 = 77$, což podle molekulové hmotnosti odpovídá benzenu bez vodíku v pozici, kde byl vázán chlór. Analyzovaná látka je tedy chlorbenzen.

Z MS spektra (b) lze podle silného signálu molekulového píku ($m/z = 146$) usoudit na aromatický systém. Přítomnost izotopových píků M, M+2 a M+4 v poměru přibližně 9:6:1 naznačuje, že molekula obsahuje dva atomy chlóru. Dehalogenací molekuly získáme monohalogenovaný fragment ($m/z = 111$ a 113 v poměru přibližně 3:1) a dehalogenovaný fragment ($m/z = 75$), který vzniká z disubstituovanému benzenu. Analyzovaná látka je tedy dichlorbenzen.

3) Zmíněné ionty jsou charakteristické pro alkoholy (fragment RCH=OH⁺, kde R = H ($m/z = 31$) nebo CH₂ ($m/z = 45$))

4) Ne, v oblasti 3100-3000 cm⁻¹ nelze očekávat charakteristický pás od 2-aminododekanu.

5) a) 1 signál, b) 2 signály