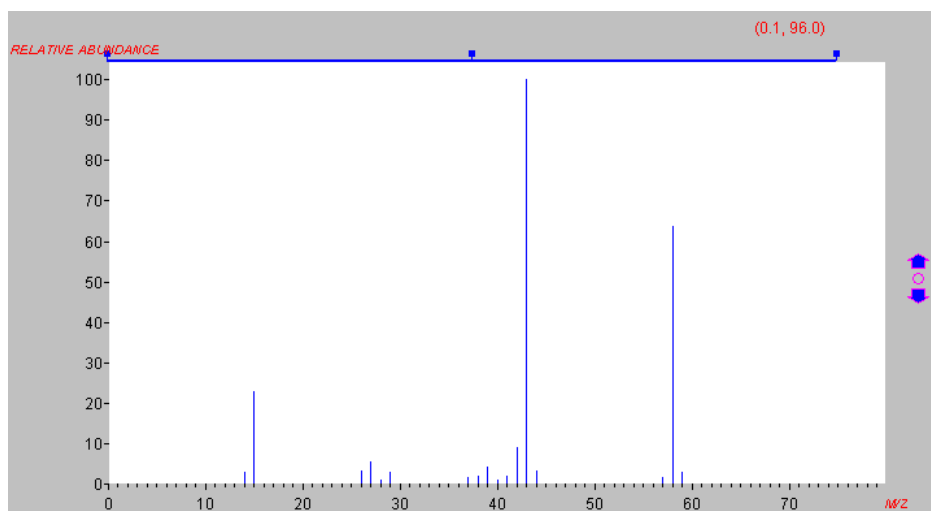


Naudodamiesi lentelėse pateikta informacija išnagrinėkite dviejų duotų cheminių junginių spektrus ir priskirkite kiekvieną spektrą atitinkamam junginiui.

Šiuose spektruose nustatykite:

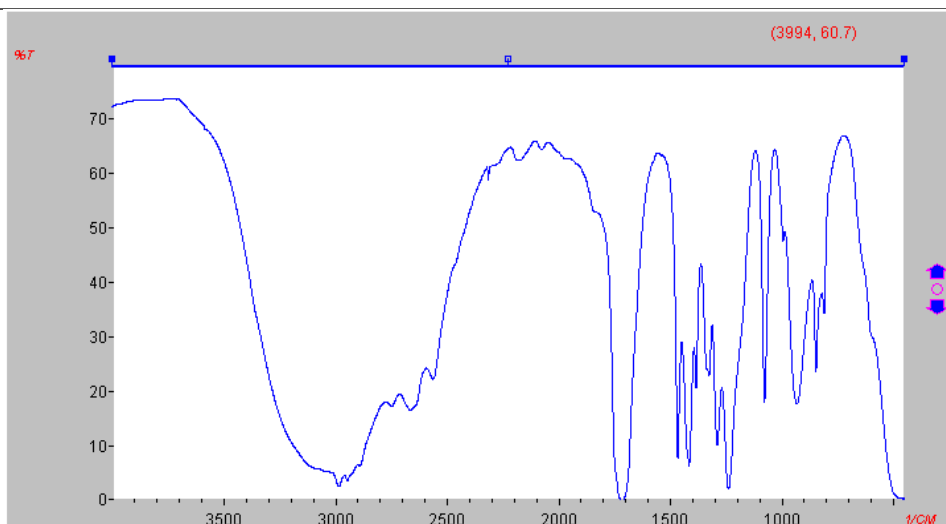
- Cheminius ryšius IR spektre
- Molekulės masę, pagal molekulinio jono fragmentą.
- Vandenilio protonų aplinkas ^1H -NMR spektruose

¹ [Animated Spectra \(ohio-state.edu\)](http://ohio-state.edu)

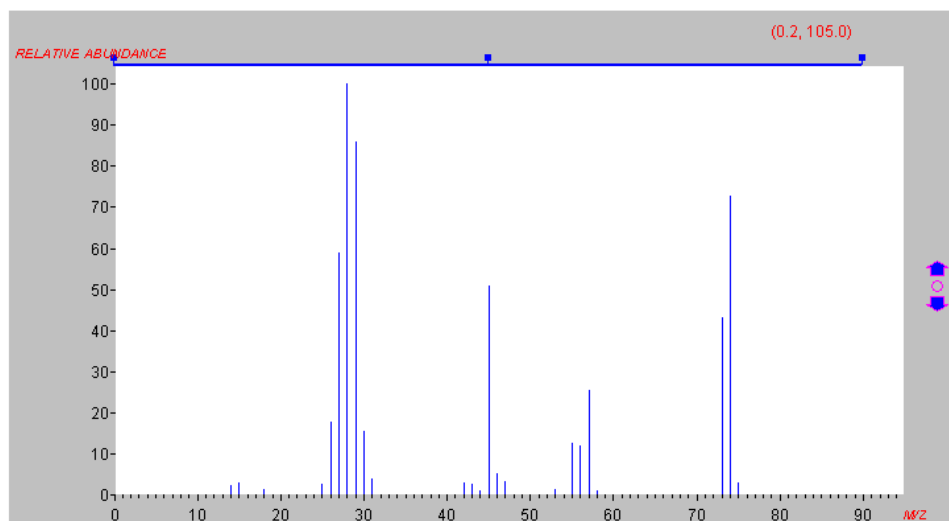


Molekulinio jono masė

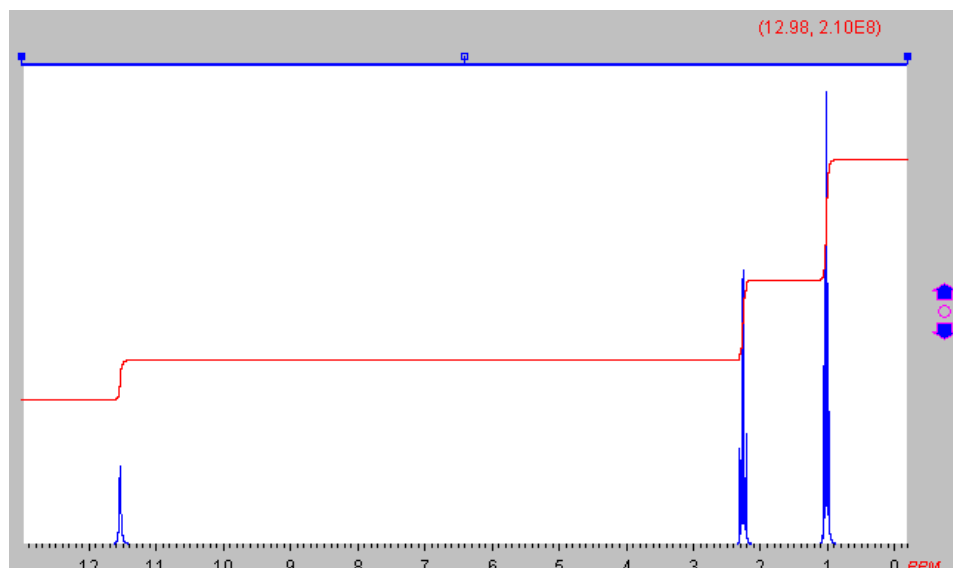
2



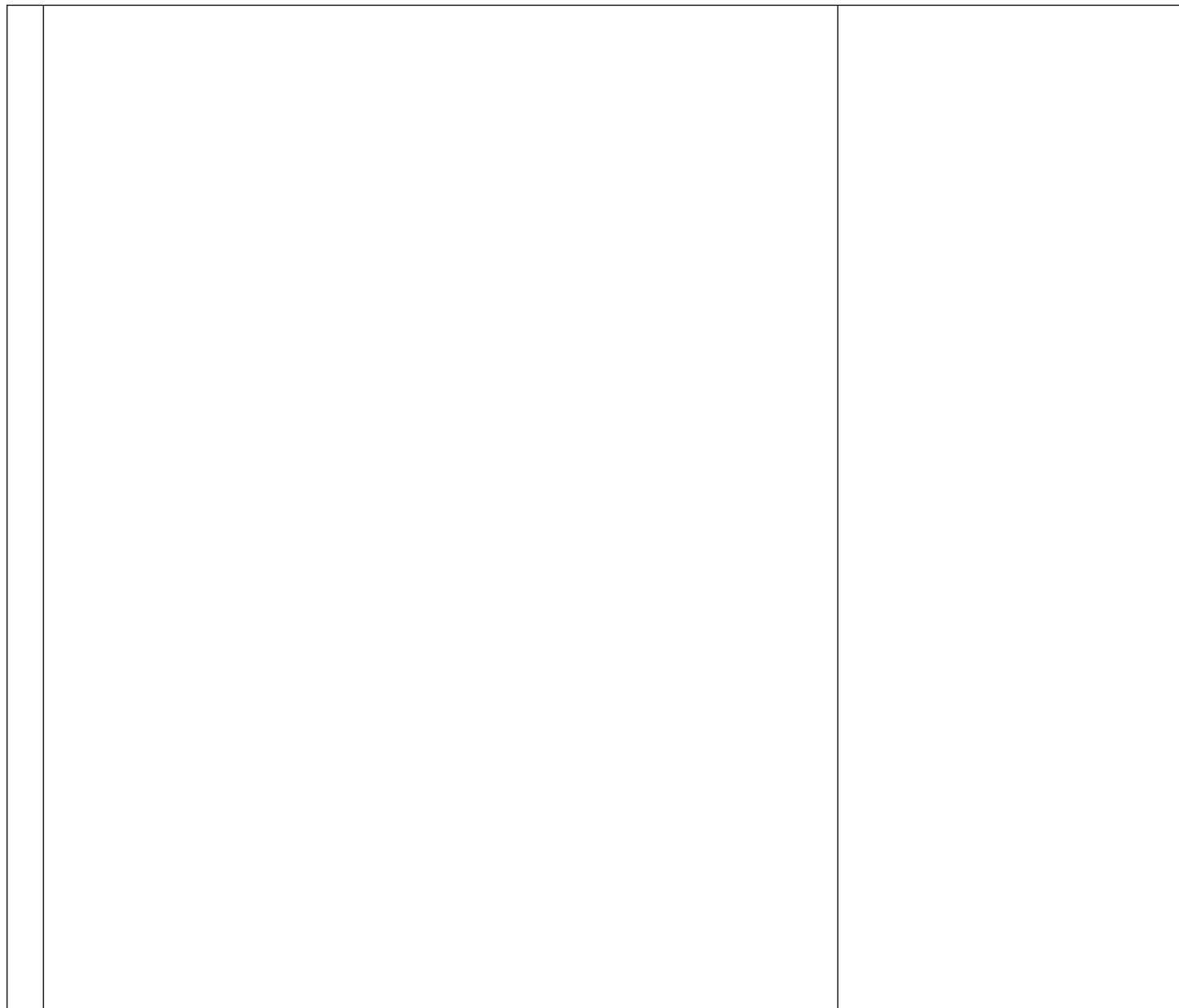
Cheminiai ryšiai



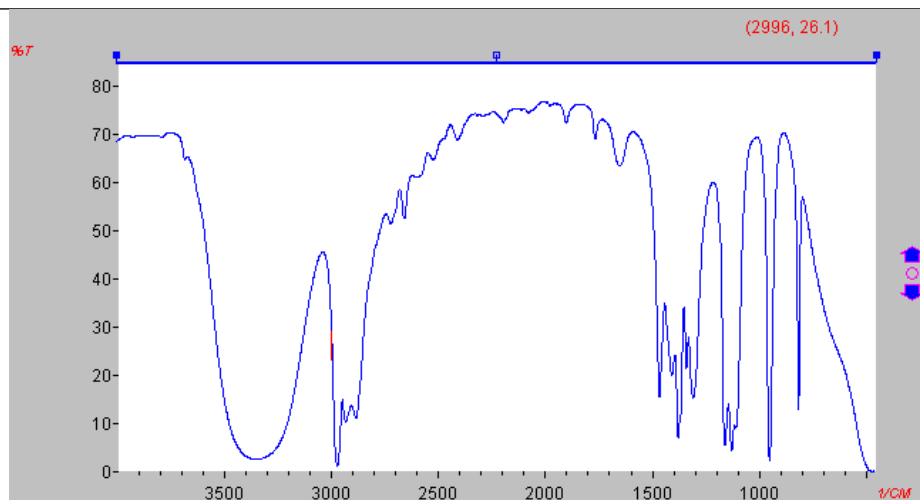
Molekulinio jono masė



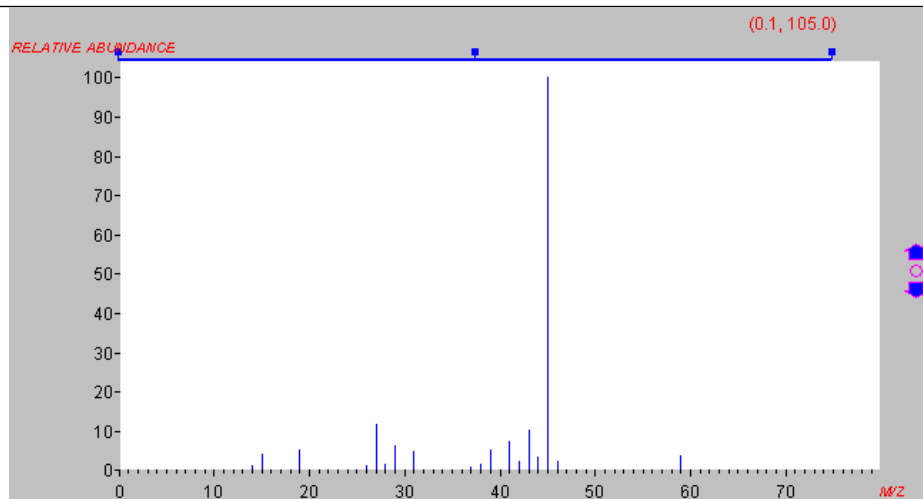
Smalių skaičius, vandenilių sk., cheminis poslinkis



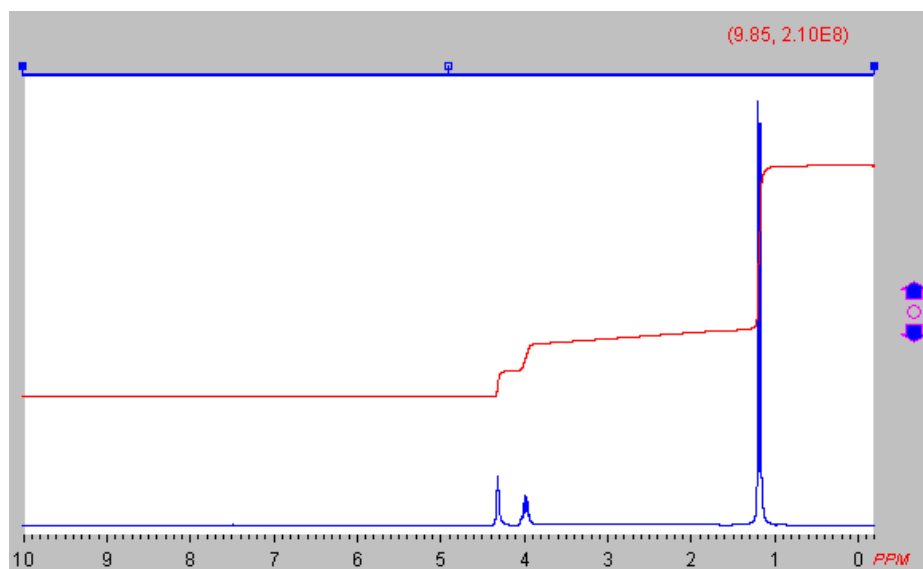
3



Cheminiai ryšiai



Smalių 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-CH ₃	0,7-1,3
R-OH	1,0-5,0
R-CH ₂ -R	1,2-1,4
RO-CH ₃ <i>R = H arba alkilo grupei</i>	3,2-3,8
R-CHO	9,0-10,0
R-COOH	11,0-12,0

[NMR Chemical Shift Values Table - Chemistry Steps](#)

Infraraudonasis spektras. Cheminių ryšių virpesių sritys²

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 masės³

Galimas fragmentas	Masė
CH ₂	14
CH ₃	15
OH	17
C ₂ H ₅	29
COOH	45

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

² Duomenys paimti iš D. Mickevičius Cheminės analizės metodai, Vilnius 1998.

³ Duomenys paimti iš D. Mickevičius Cheminės analizės metodai, Vilnius 1998.