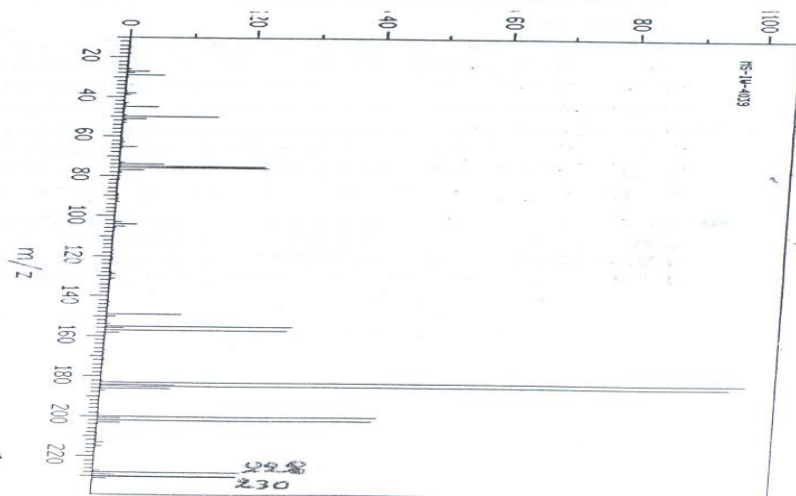
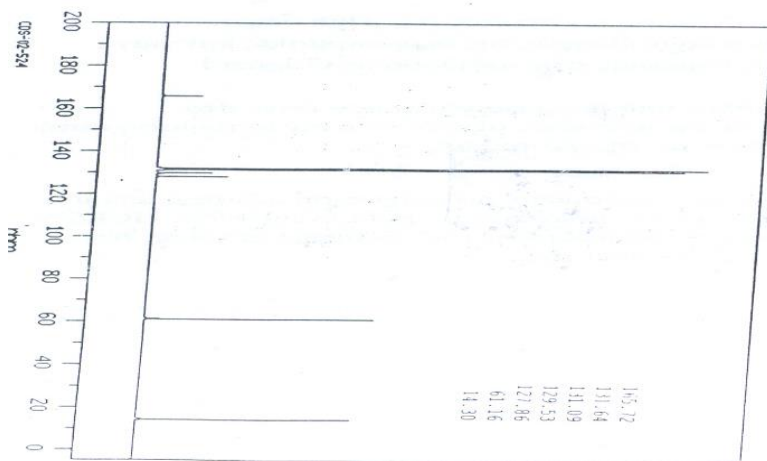
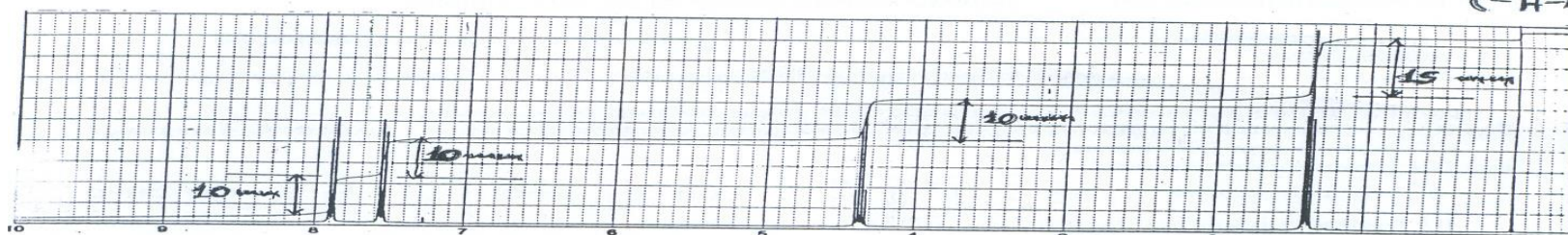
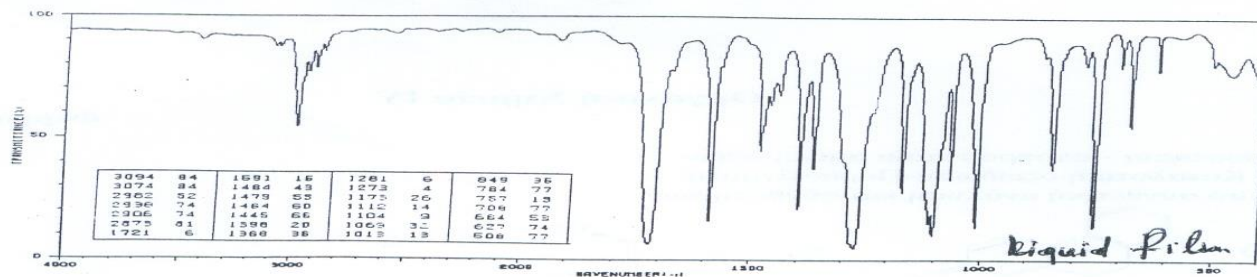


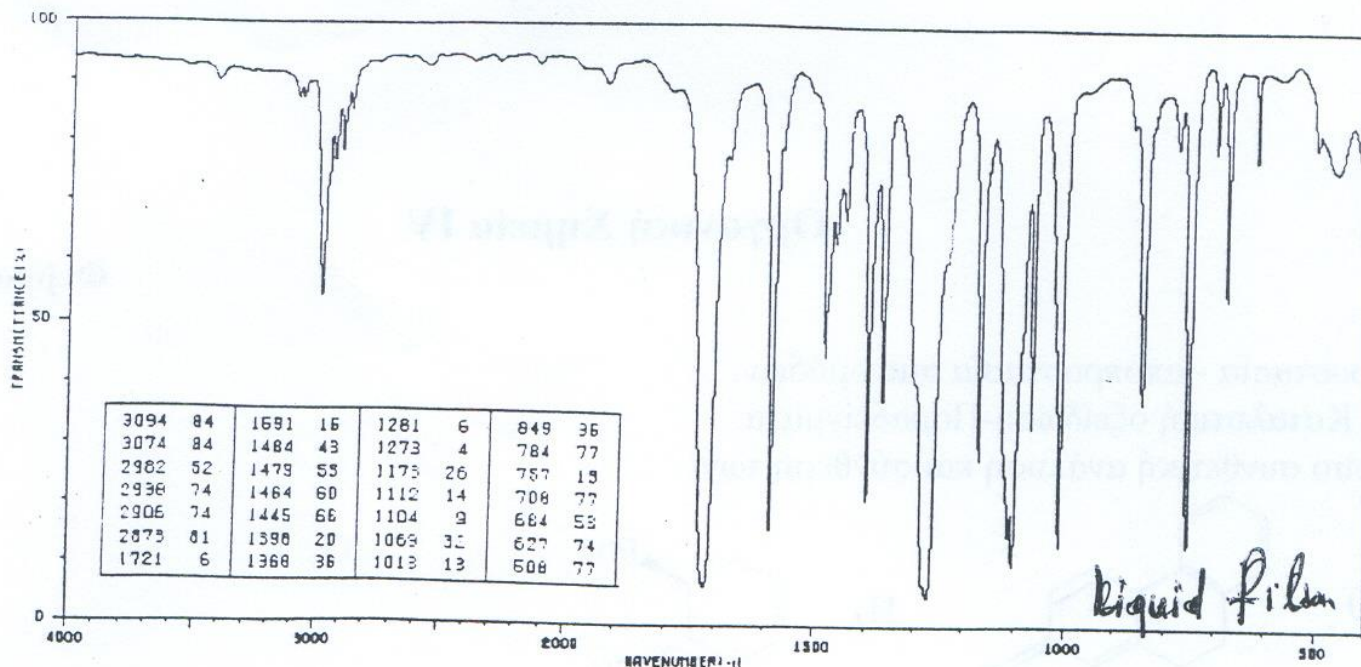
ΑΣΚΗΣΕΙΣ ΤΑΥΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΕΝΩΣΕΩΝ

1^η Άσκηση. Η στοιχειακή ανάλυση μιας ένωσης έδωσε αρνητικά αποτελέσματα για ανίχνευση N, S και θετικά για την ανίχνευση X. Η ένωση αυτή είναι αδιάλυτη σε H₂O, NaOH 10%, HCl 5% και διαλυτή σε πυκνό H₂SO₄, ενώ έχει τα παρακάτω φασματοσκοπικά δεδομένα. Να βρεθεί ο συντακτικός της τύπος και να εξηγηθούν τα φάσματά της.

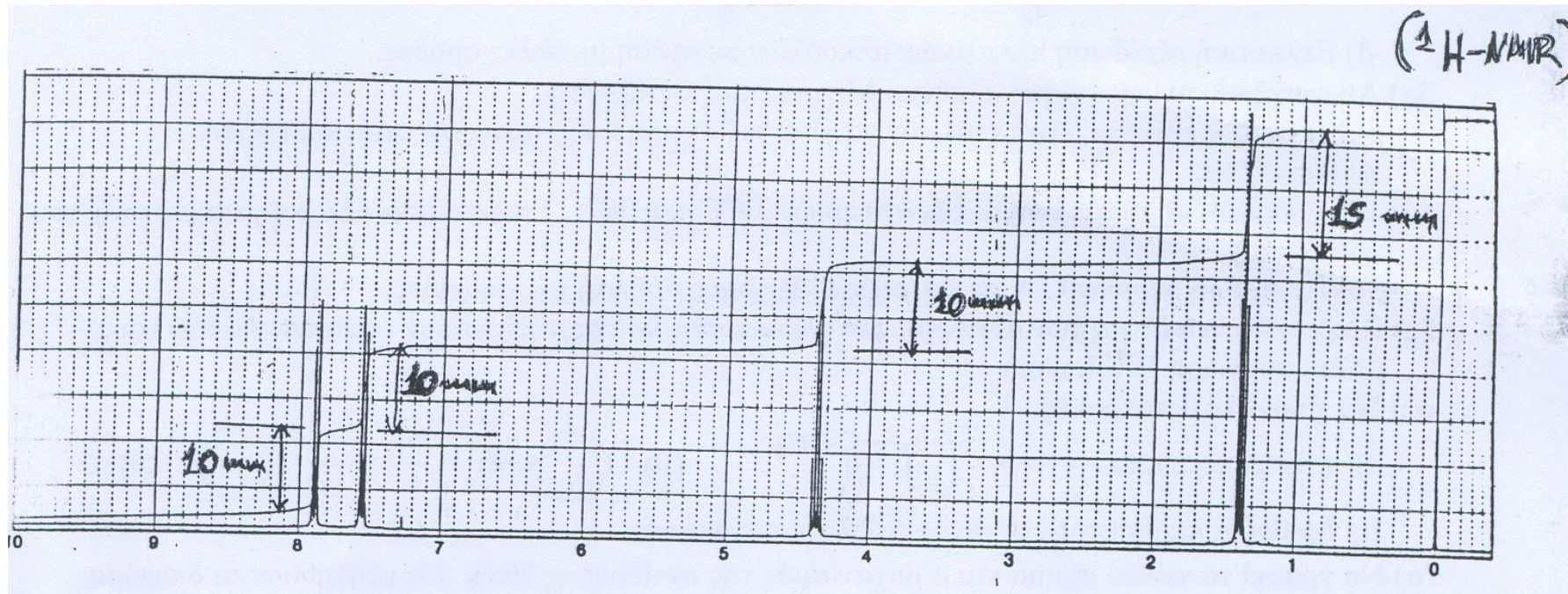


Λήψη σημαντικών πληροφοριών από τα φάσματα της υπό μελέτη ένωσης

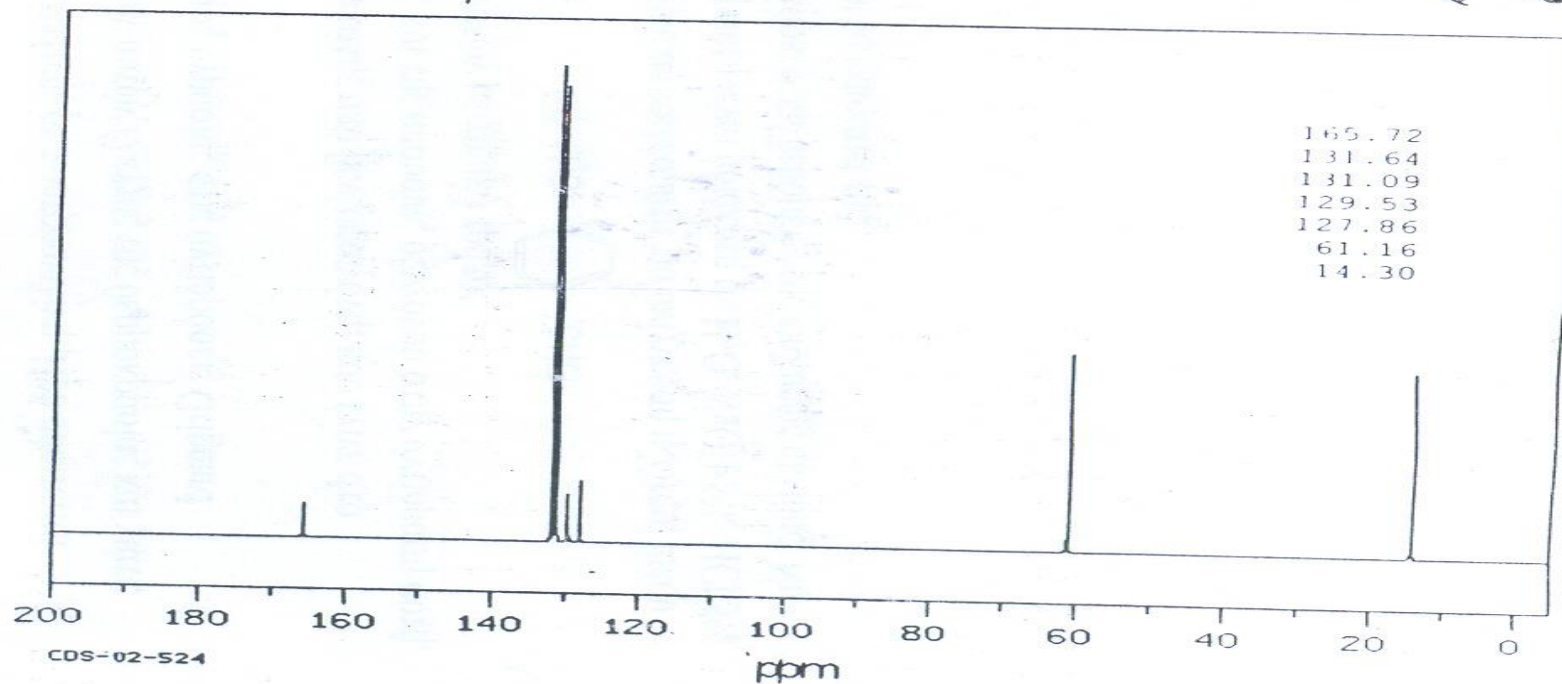
(IR)



IR (cm⁻¹): 2982, 2875 Απορρόφηση ν-CH₂,
 1721 Απορρόφηση ν-C=O
 1581 Απορρόφηση ν-C_{ar}=C_{ar}
 1273 Απορρόφηση ν-C-O



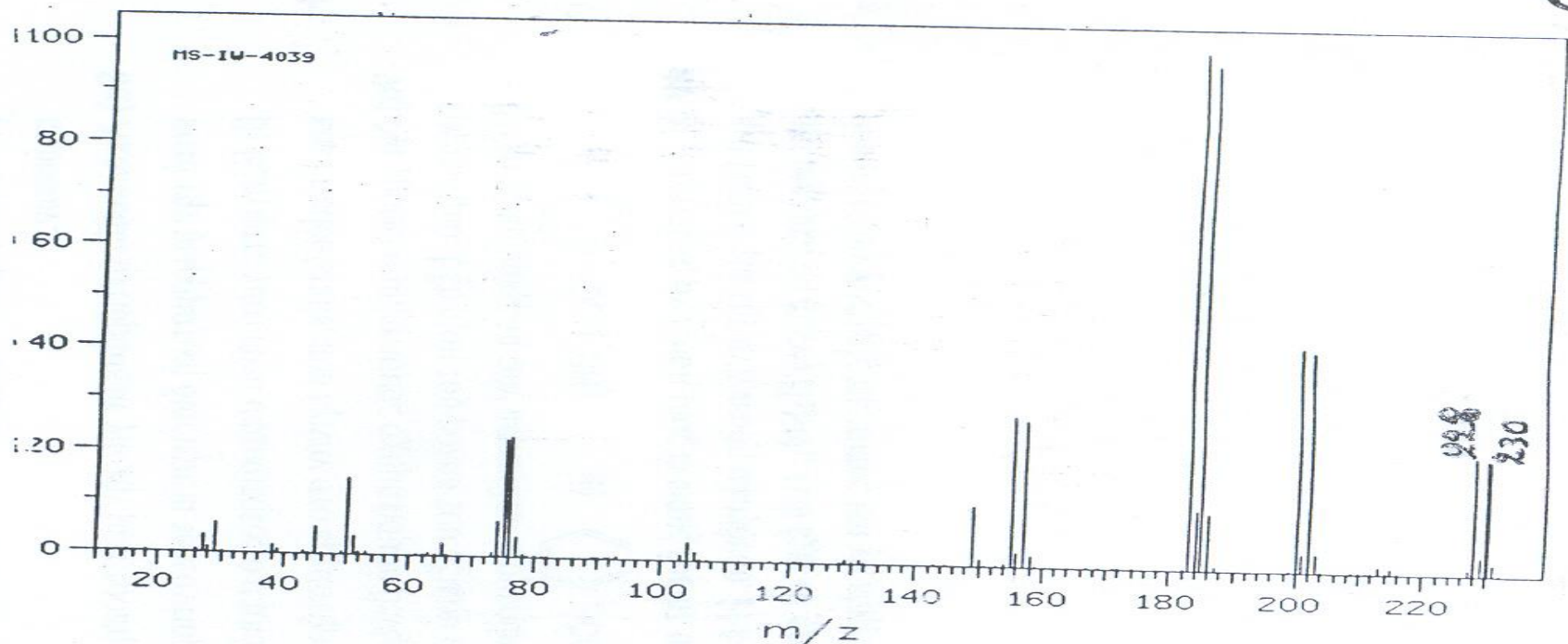
$^1\text{H-NMR}$ (δ): 7.55 (d), 7.90 (d), Ισομεγέθεις. Ενδεικτικό π-υποκατάστασης αρωματικού δακτυλίου. 4.35 (q), ισομεγέθης με προηγούμενα, 1.40 (t), σε αναλογία 3:2 με το προηγούμενο. Ένδειξη ύπαρξης OCH_2CH_3 ομάδας.



^{13}C -NMR (ppm): 165,7. **C καρβονυλίου εστέρα.**

131,6, 131,1, 129,5, 127,9 [Δύο μεγάλα και δυο μικρά (Τεταρτ. C) σήματα στην περιοχή των αρωματικών C]. **Ένδειξη π-υποκατάστασης.**

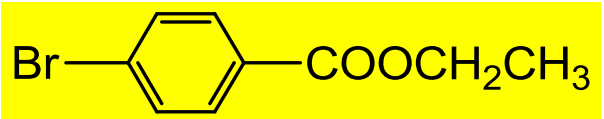
61,2. **C της OCH_2 ομάδας.**



MS: m/z : 228/230, 200/202, 183/185, 155/157. Ένδειξη ύπαρξης ενός ατόμου Br (ισότοπα Br^{79} και Br^{81}).

Αποσπάσεις -28, -45, -73 (45 και 28) από το Μοριακό ιόν. Ένδειξη ύπαρξης της $\text{C}(=\text{O})\text{OEt}$ ομάδας.

Με συνδυασμό των παραπάνω στοιχείων φαίνεται ότι ο Συντακτικός Τύπος της άγνωστης ένωσης είναι:



Η ένωση ανήκει στην τάξη Ν. Η αποτίμηση των φασμάτων της είναι:

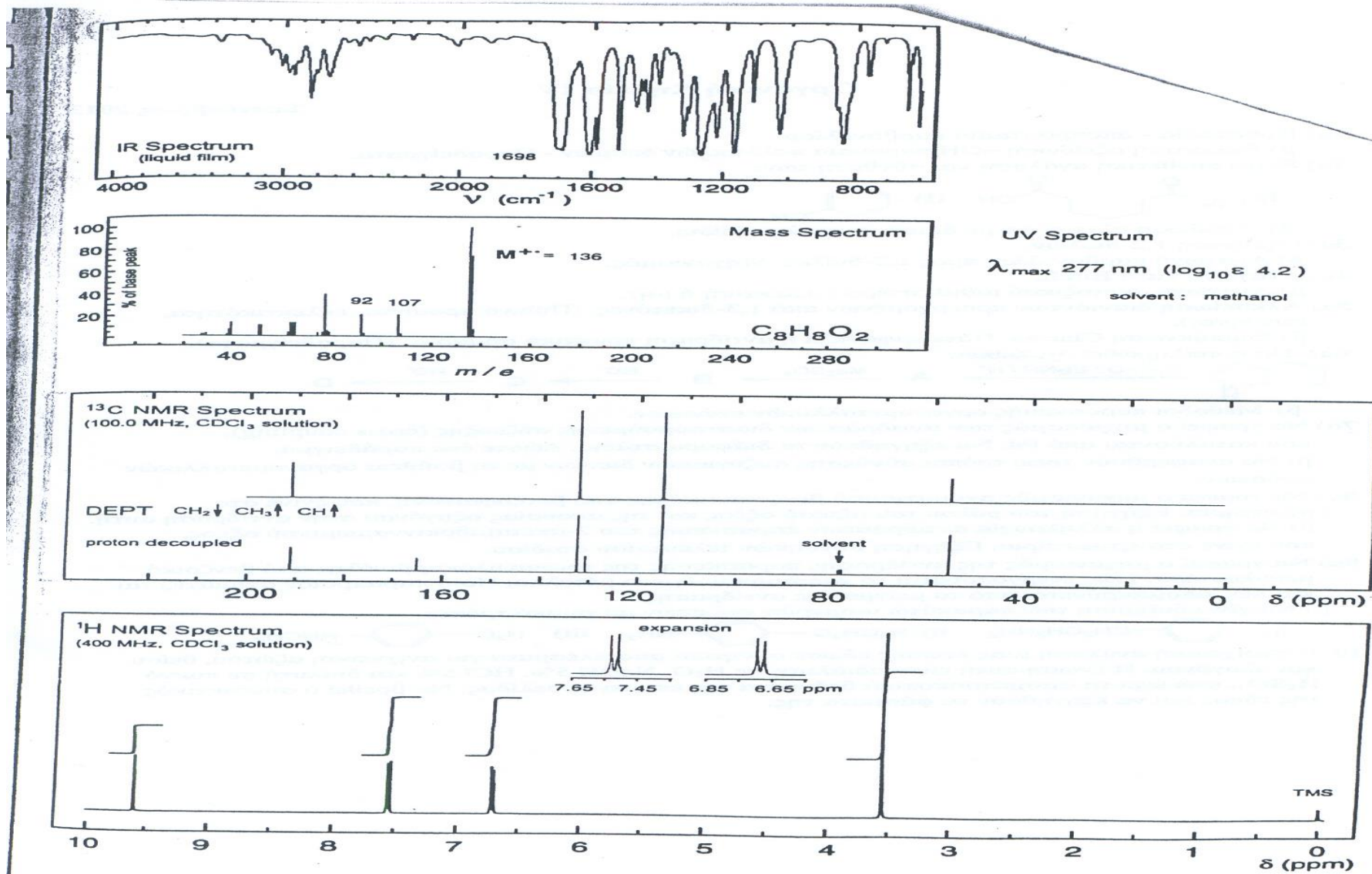
IR (cm⁻¹): 3094, 3074, ν -C_{αρ}-H. 2982, ν _{ασ}. CH₂. 2873, ν _{συμ}. CH₂. 1721, ν -C=O (εστέρα). 1591, 1484, ν -C_{αρ}=C_{αρ}. • 1281, 1273, ν -C-O. 849, π -υποκατάσταση (δόνηση κάμψης εκτός επιπέδου).

¹H-NMR (δ): 1.40 (t, 3H, $J=7.7$ Hz, CH₃), 4.35 (q, 2H, $J=7.7$ Hz, OCH₂), 7.55 (d, 2H, $J=8.5$ Hz, **o-H προς Br**), 7.90 (d, 2H, $J=8.5$ Hz, **o-H προς C=O**).

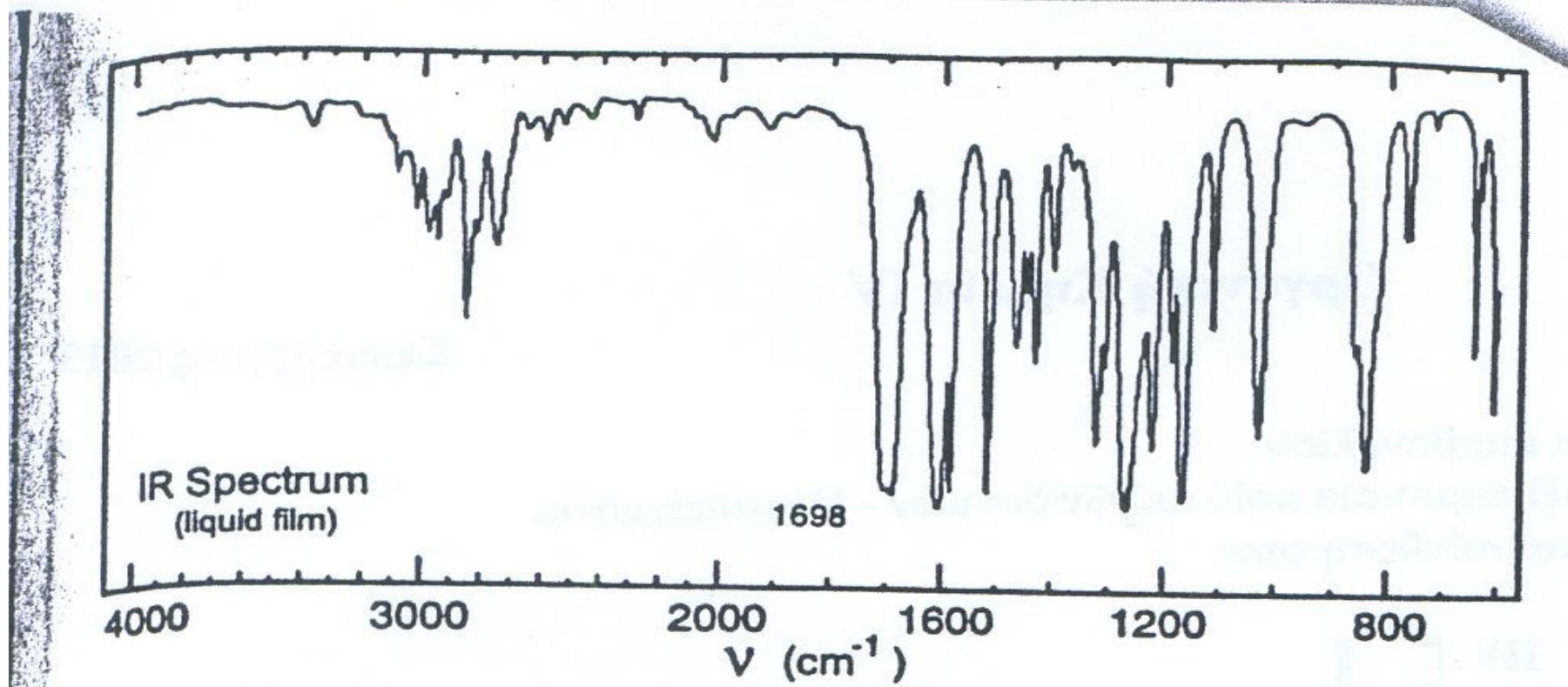
¹³C-NMR (ppm): 14.3 (CH₃), 61.2 (OCH₂), 127.9 (C-Br), 129.5 (C-COOEt), 131.1 (C=C-COOEt), 131.6 (C=C-Br), 165.7 (COOEt).

MS, m/z: 228/230 (M⁺, 20%), 200/202 (40%, M-CH₂=CH₂), 183/185 (100%, M-OEt), 155/157 (25%, M-COOEt), 149 (10%, M-Br), 76 (20%, C₆H₄⁺), 75 (20%, C₆H₃⁺), 50 (15%, C₄H₂⁺).

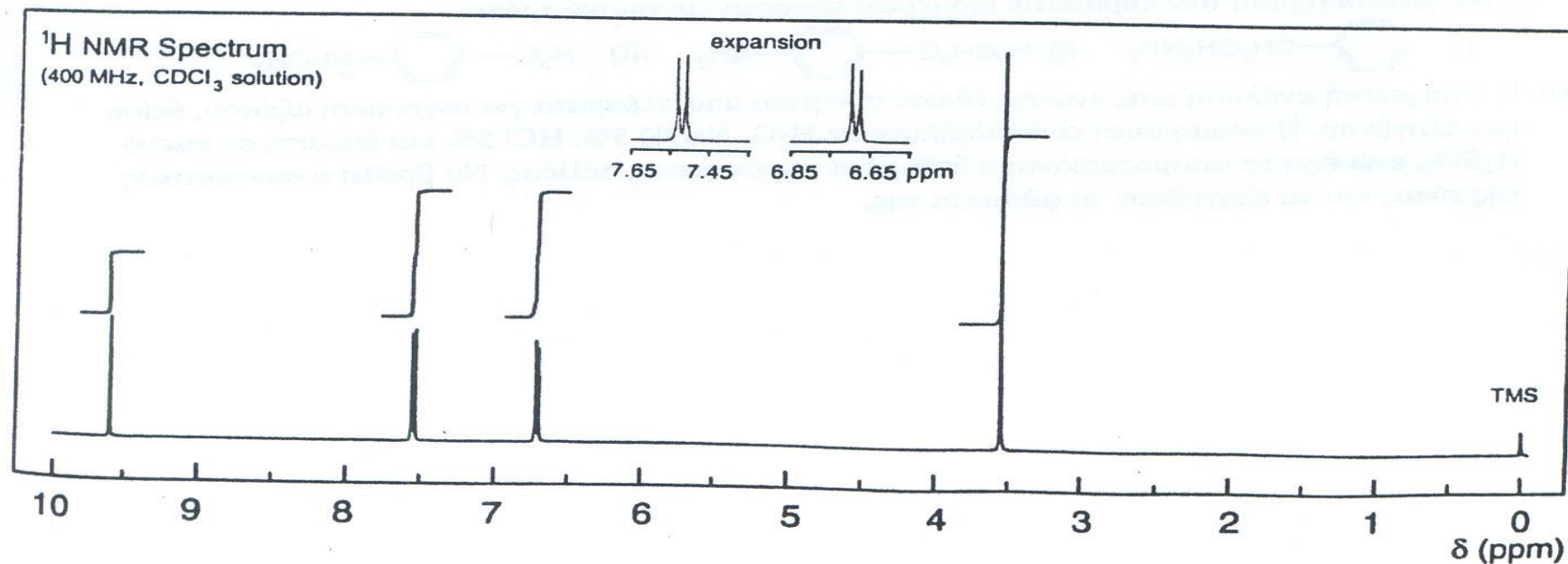
2^η Άσκηση. Η στοιχειακή ανάλυση μιας ένωσης έδωσε αρνητικά αποτελέσματα για ανίχνευση N, S και X. Η ένωση αυτή είναι αδιάλυτη σε H₂O, NaOH 10%, HCl 5% και διαλυτή σε πυκνό H₂SO₄, ενώ έχει τα παρακάτω φασματοσκοπικά δεδομένα. Να βρεθεί ο συντακτικός της τύπος και να εξηγηθούν τα φάσματά της.



Λήψη σημαντικών πληροφοριών από τα φάσματα της υπό μελέτη ένωσης



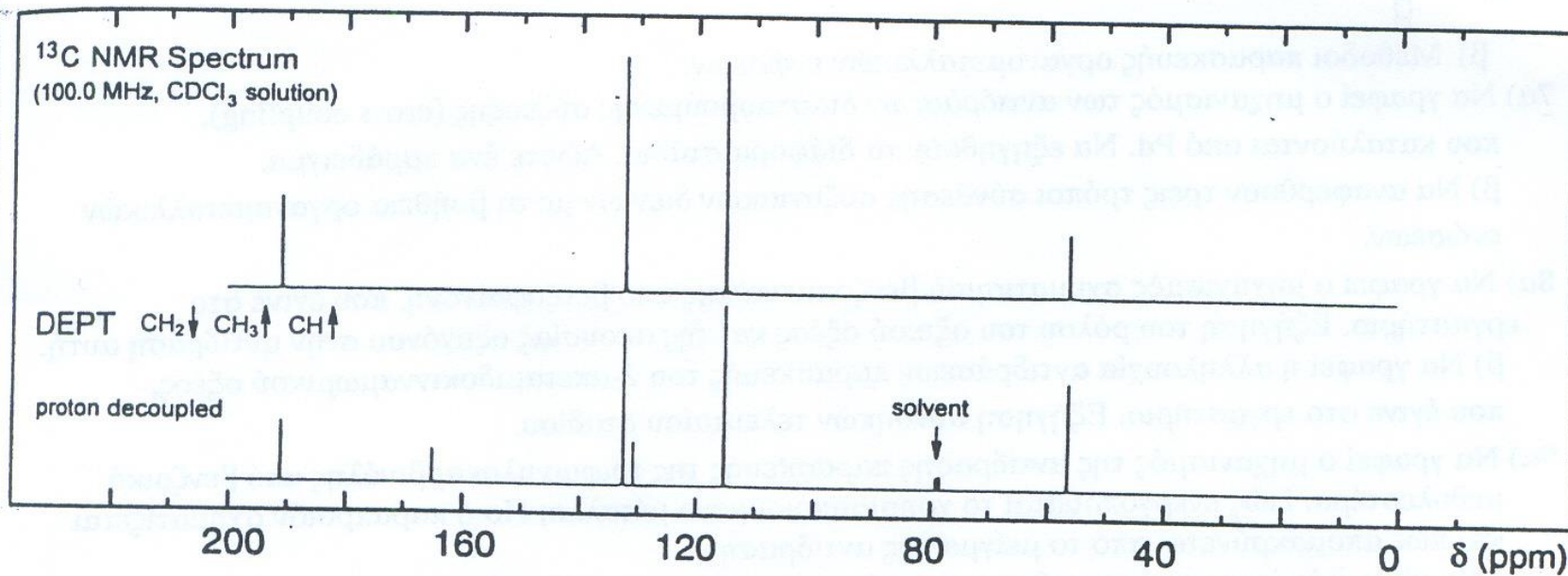
IR (cm^{-1}): 3080, 3020 Απορρόφηση $\nu\text{-C}_{\text{ar}}\text{-H}$
2950, 2840 Απορρόφηση $\nu\text{-CH}_3$,
2750 Απορρόφηση $\nu\text{-CH (CH=O)}$
1698 Απορρόφηση $\nu\text{-C=O}$
1605, 1580, 1510 Απορρόφηση $\nu\text{-C}_{\text{ar}}=\text{C}_{\text{ar}}$
1270 Απορρόφηση $\nu\text{-C-O}$
820 π-υποκατάσταση



¹H-NMR (δ): 7.55 (d), 6.70 (d), Ισομεγέθεις. Ενδεικτικό π-υποκατάστασης αρωματικού δακτυλίου.

9.60 (s), το 1/2 των προηγούμενων. Ένδειξη ύπαρξης CH=O ομάδας.

3.55 (s), 3/2 των αρχικών. Ένδειξη ύπαρξης OCH₃ ομάδας.

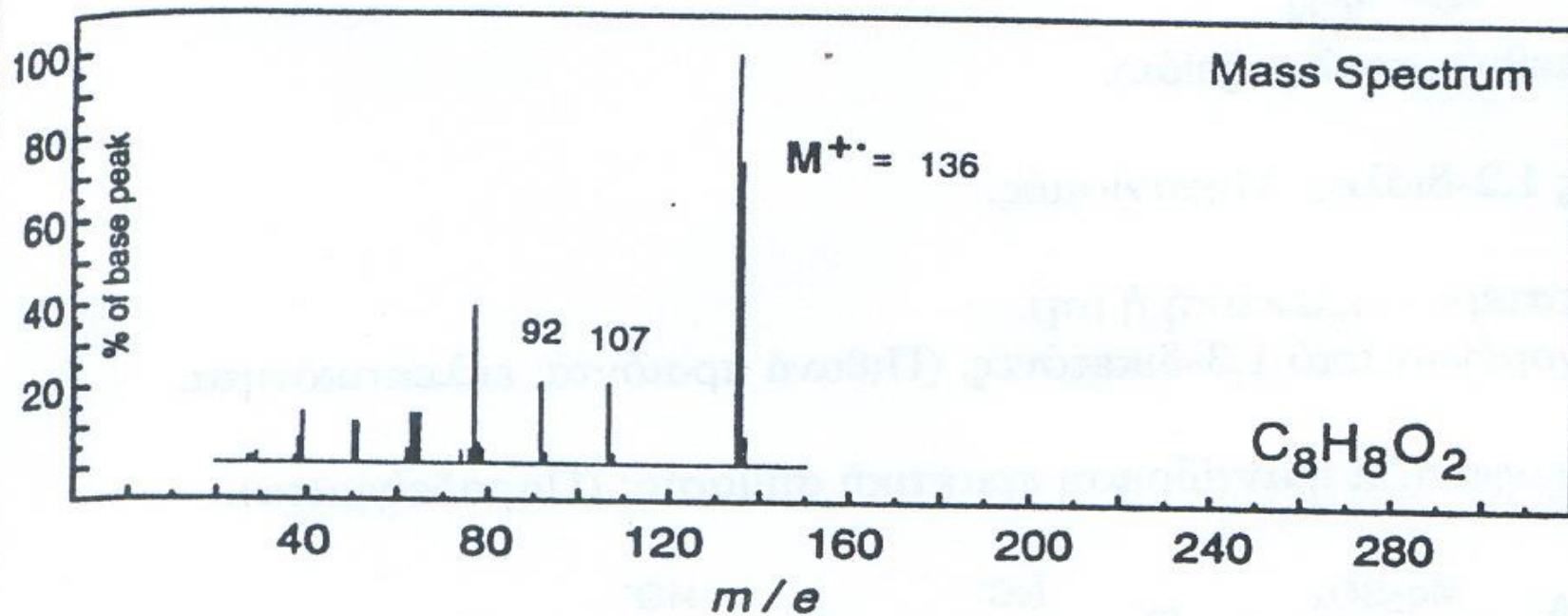


¹³C-NMR (ppm): 192.0. **C καρβονυλίου .**

165.0, 132.0, 130.5, 116.0 [Δύο μεγάλα και δυο μικρά (Τεταρτ. C) σήματα στην περιοχή αρωματικών C]. **Ένδειξη π-υποκατάστασης.**

57.0. **C της OCH₃ ομάδας.**

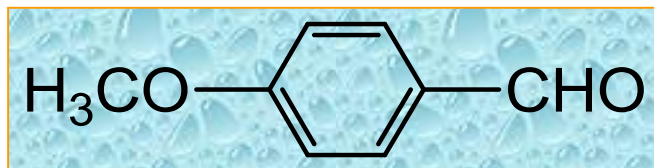
DEPT: **Δεν υπάρχουν μεθυλενικές ομάδες.**



MS: m/z : 136. **Μοριακό ιόν.**

Αποσπάσεις -29, -15, -31. Ένδειξη ύπαρξης των $CH(=O)$, OCH_3 ομάδων.

Με συνδυασμό των παραπάνω στοιχείων φαίνεται ότι ο Συντακτικός Τύπος της άγνωστης ένωσης είναι:



Η ένωση ανήκει στην τάξη Ν. Η αποτίμηση των φασμάτων της είναι:

UV: 277 nm ($\log_{10}\epsilon=4.2$), **C=O**.

IR (cm⁻¹): 3080, 3020, ν -C_{αρ}-H. 2950, $\nu_{ασ}$. CH₃. 2840, $\nu_{συμ}$. CH₃. 2750, ν -CH (HC=O). 1698, ν -C=O (εστέρα). 1605, 1580, 1510, ν -C_{αρ}=C_{αρ}. 1270, ν -C-O. 820, π -υποκατάσταση (δόνηση κάμψης εκτός επιπέδου).

¹H-NMR (δ): 3.55 (s, 3H, OCH₃), 6.90 (d, 2H, $J=8.9$ Hz, o -H προς OCH₃), 7.55 (d, 2H, $J=8.9$ Hz, o -H προς C=O), 9.60 (s, 1H, HC=O).

¹³C-NMR (ppm): 57.0 (OCH₃), 116.0 (C=C-OMe), 130.5 (C-CHO), 132.0 (C=C-CHO), 165.0 (C=C-OMe), 192.0 (C=O).

MS, m/z: 136 (M⁺, 100%), 107 (20%, M-CH=O), 92 (20%, M-CH=O - Me), 76 (40%, M-CH=O - OMe).