

1. Olettaen, että massaspektrin peruspiikki (100%) on myös molekyylipiikki, mitkä piikit esiintyvät seuraavien yhdisteiden massaspektriessä?

- C_2H_5BrO
- C_{60}
- C_6H_4BrCl

Ehdota kohtien a) ja c) molekyyleille rakennetta. Mikä yhdiste on b)?

Isotoopit: ^{79}Br ^{81}Br suhteessa 1:1
 ^{35}Cl ^{37}Cl ————— 3:1
 ^{12}C ^{13}C ————— 98.9:1.1

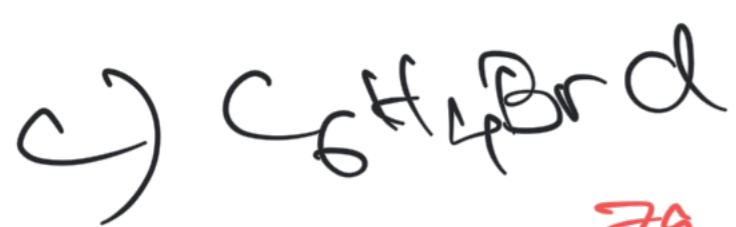
a) C_2H_5BrO kaksi molekyyli-ioniä

$$\left. \begin{array}{l} 2 \cdot 12 + 5 \cdot 1 + 79 + 16 = 124 \\ 2 \cdot 12 + 5 \cdot 1 + 81 + 16 = 126 \end{array} \right\} 1:1$$

pienet piikit 125 ja 127 $2 \cdot 1.1\% = 2.2\%$

b) C_{60} molekyylipiikki $60 \cdot 12 = 720$.

isotoppipiikki 1 kpl ^{13}C : $60 \cdot 1.1\% = 6.6\%$



190

Br

Cl

suhde

1

3

3



192

1

3

3



192

1

1

1



194

1

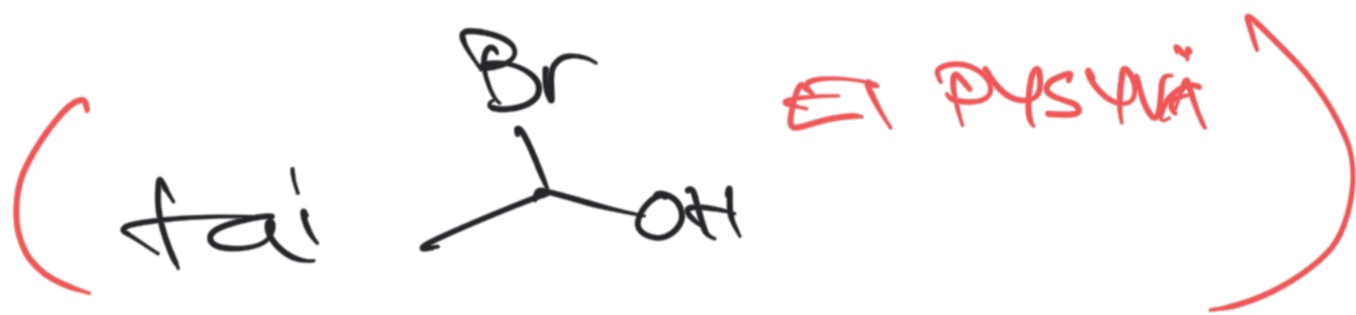
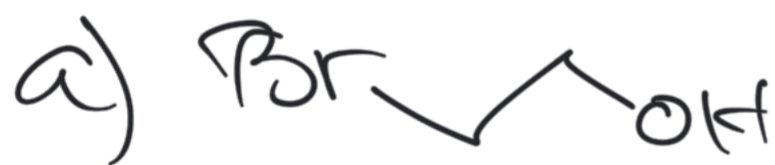
1

1

PIIKIT 190:192:194 SUHTESSA ~~Br:Cl:1~~

hiili-isotoopista aiheutuvat 191:193:195 6.6%
edellisistä.

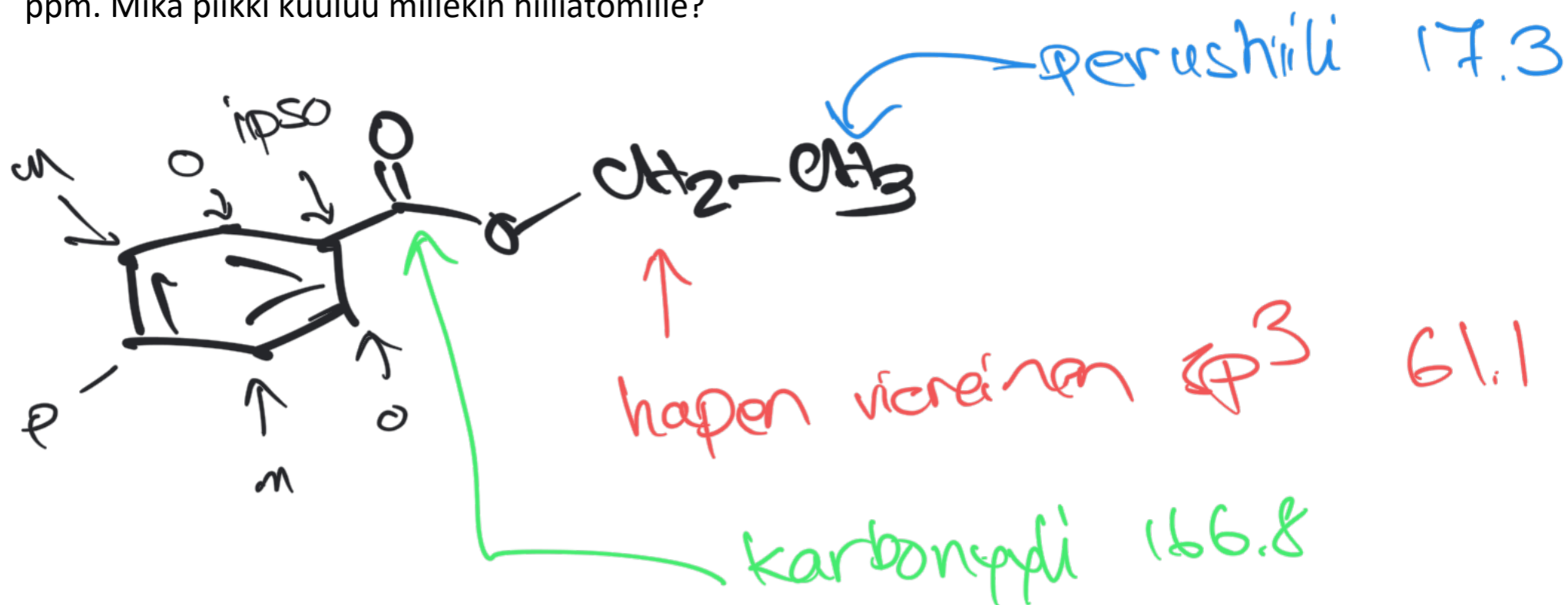
RAKENTEET, esim.



b) fulleneeni



2. Etyylibentsoaatin PhCOOEt ^{13}C NMR-spektrissä on piikit δ 17.3, 61.1, 100-150 (neljä piikkiä) ja 166.8 ppm. Mikä piikki kuuluu millekin hiiliatomille?

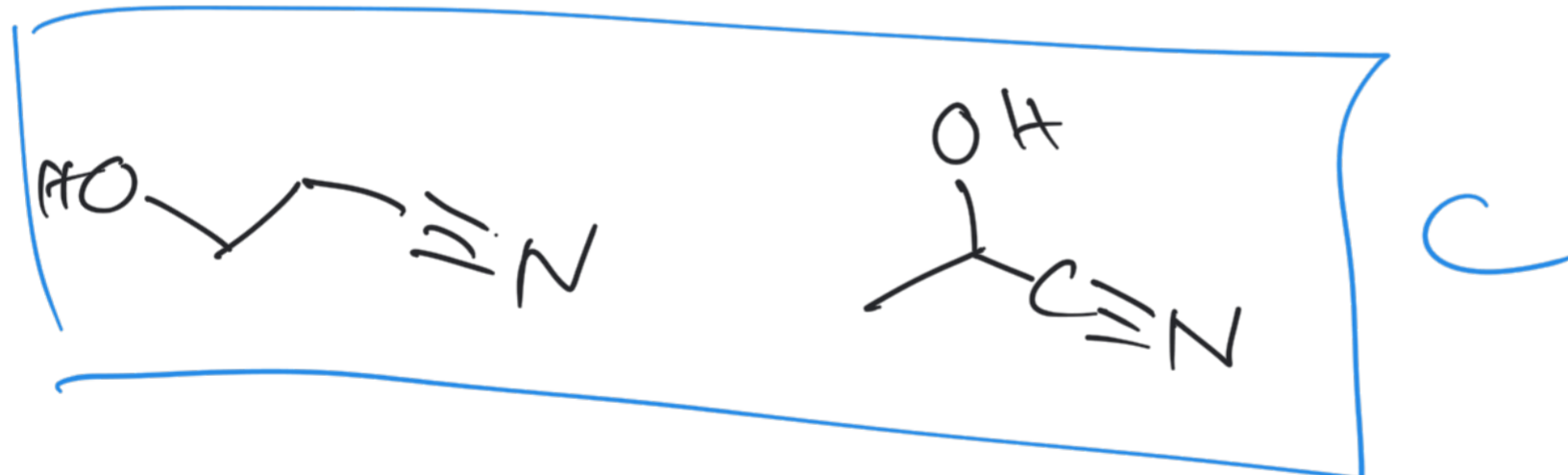
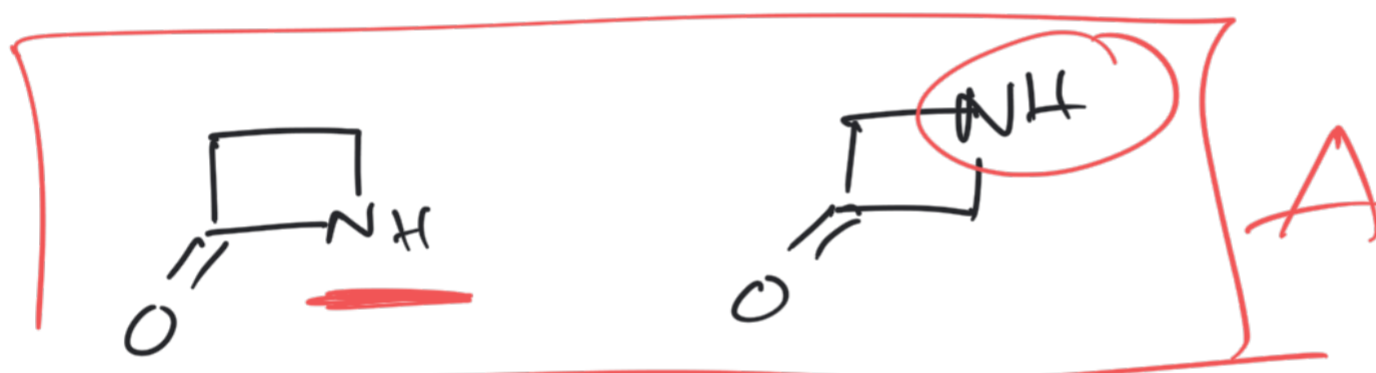


ipso = bentseenirenkaan substituutty hiili 1 kpl
 orto = o = viereinen 2 kpl
 para = p = vastakkainen 1 kpl
 meta = m = "se muu" 2 kpl
 bentseenirenkaan hiilet 100 - 150 ppm

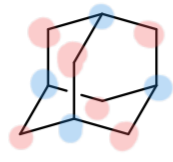
3. Kolmella yhdisteellä oli rakennekaava C_3H_5NO . ja niiden IR-spektrit on esitetty alla. Mitkä ovat yhdisteiden a-c rakenteet. Ilman ^{13}C NMR dataa kannattaa piirtää (kaikki) mahdolliset rakenteet ennen kuin esität ratkaisun. Miksi ^{13}C NMR data helpottaisi?

- a. ν (cm^{-1}): yksi terävä >3000 (sharp), 1700 (strong)
 b. ν (cm^{-1}): 2 terävää >3000 (sharp), 2 piikkiä välillä $1600-1700$
 c. ν (cm^{-1}): yksi vahva >3000 (broad), heikko piikki n 2200 .

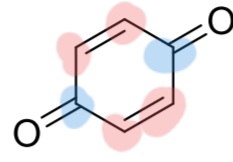
$$C_3H_5NO \quad \text{TA} = 3 + 1 - \frac{5 - 1}{2} = 4 - 2 = 2$$



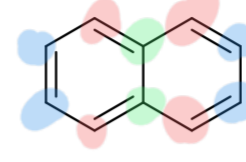
4. Kuinka monta signaalia odottaisit olevan seuraavien yhdisteiden ^{13}C NMR spektreissä?



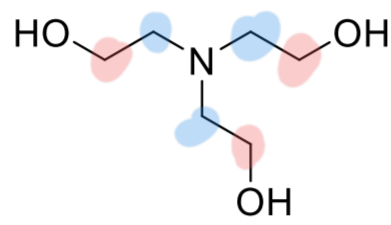
A
adamantaani



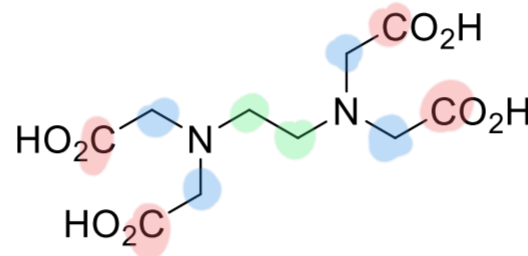
B
bentsokinoni



C
naftaleeni



D
trietanoliamiini



E
EDTA (etyleenidiiamiinitetraetikkahappo)

PINKKÄÄ

INTENSITEETISUHTE

A	2	6:4	3:2
B	2	4:2	2:1
C	3	4:4:2	2:2:1
D	2	3:3	1:1
E	3	4:4:2	2:2:1