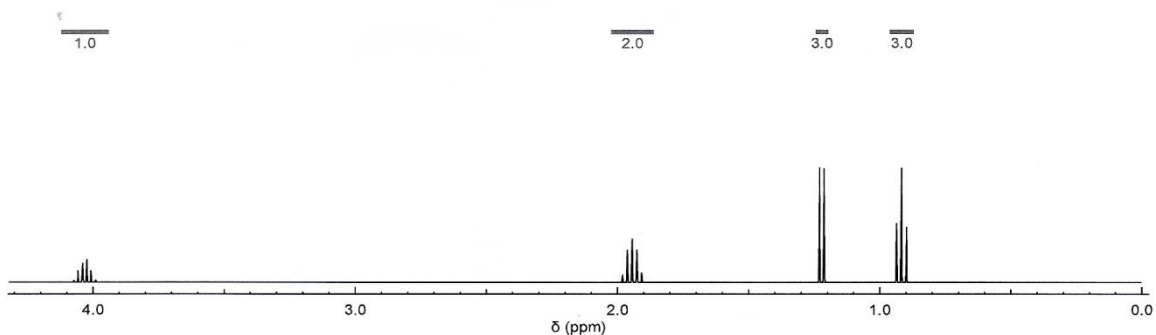


## Ερώτηση

Ένα (1) λίτρο ενός αέριου αλκανίου που μετρήθηκε σε συνθήκες STP, έχει μάζα 2,589 g. Το αλκάνιο μονοβρωμίζεται στις κατάλληλες συνθήκες και το προϊόν που προκύπτει δίνει το πιο κάτω φάσμα  $^1\text{H-NMR}$ .



Αξιοποιώντας όλες τις πληροφορίες που δίνονται:

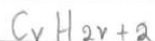
- Να υπολογίσετε τον Μ.Τ. του αλκανίου.
- Να γράψετε τον Σ.Τ. του προϊόντος που προκύπτει από τη μονοβρωμίωση του αλκανίου καταγράφοντας τους συλλογισμούς σας στον πιο κάτω πίνακα.

Χημική μετατόπιση /ppm	Παράγοντας Ολοκλήρωσης	Πολλαπλότητα	Συμπέρασμα	Δομικό χαρακτηριστικό

- Να γράψετε τον μηχανισμό της αντίδρασης μονοβρωμίωσης του πιο πάνω αλκανίου που ακολουθείται, χρησιμοποιώντας τους κατάλληλους Σ.Τ. και συμβολισμούς.

Προτεινόμενη λύση

α) Υπολογισμός Μ.Τ. αλκαρίου



$$\left. \begin{array}{l} 1L \rightarrow 2,589g \\ 22,4L \quad X = 58g \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} C_n H_{2n+2} = 58 \\ 14n = 56 \\ n = 4 \end{array}$$

Μ.Τ. αλκαρίου:  $C_4H_{10}$

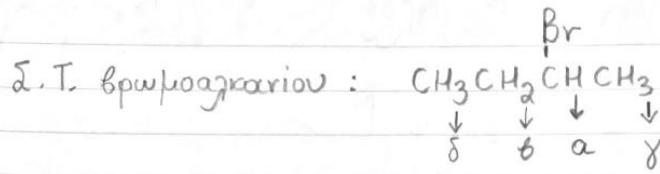
(Το αλκάνιο μονοβρωμιώνεται εύκολα με τη χημική αντίδραση)



β) Ανάλυση φάσματος  $^1H-NMR$  του αλκαρίου.

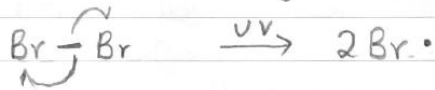
(4) Στο φάσμα  $^1H-NMR$  εμφανίζονται 4 κορυφές  $\rightarrow$   
Στο μόριο του βρωμοαλκαρίου περιέχονται 4 διαφορετικά πρωτόνια ως προς το περιβάλλον τους.

	$\delta$ (ppm)	Παράγοντας Ολοκλήρωσης	Πολλαπλασιαστές	Συμπέρασμα	Δομικό Παρασκεύασμα
α)	4,1	1	εξαπλή	1 άτομο H με 5 άτομα H 6ε γειτονικό C	$CH_3CH_2CH_2$
β)	1,9	2	πενταπλή	2 ισοδύναμα H με 4 άτομα H 6ε γειτονικό C	$CH_3CH_2CH$ ή $(CH_2CH_2CH_2)$
γ)	1,2	3	διπλή	3 ισοδύναμα H με 1 άτομο H 6ε γειτονικό C	$CH_3CH$
δ)	0,8	3	τριπλή	3 ισοδύναμα H με 2 άτομα H 6ε γειτονικό C	$CH_3CH_2$

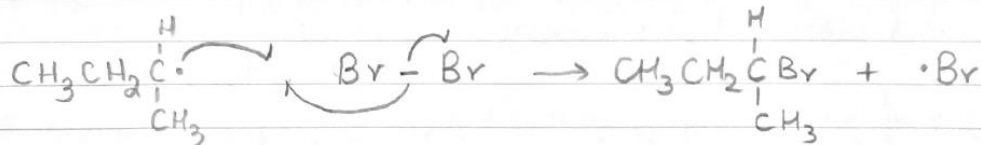
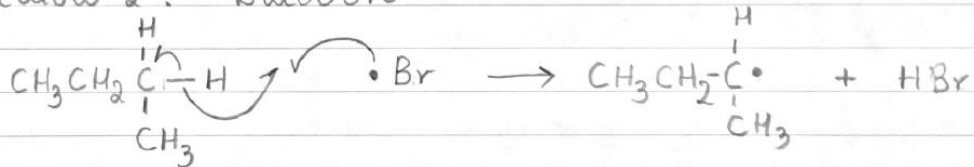


γ) Μηχανισμός μοχλοβρωμίωσης του αζτανίου μέσω ελεύθερων ριζών

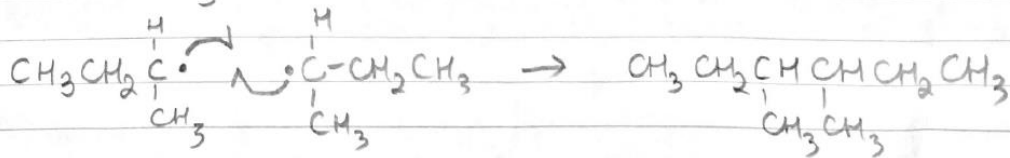
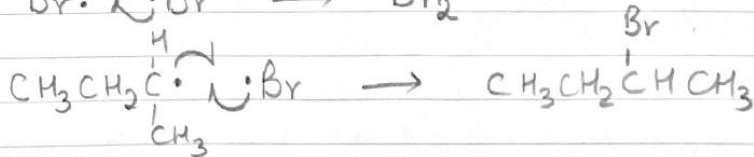
Στάδιο 1: Έραξη



Στάδιο 2: Διάδοση

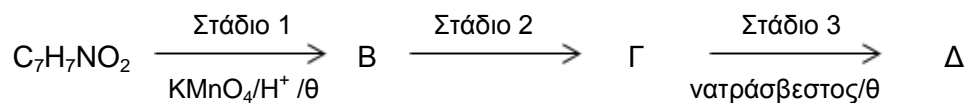


Στάδιο 3: Τερματισμός.



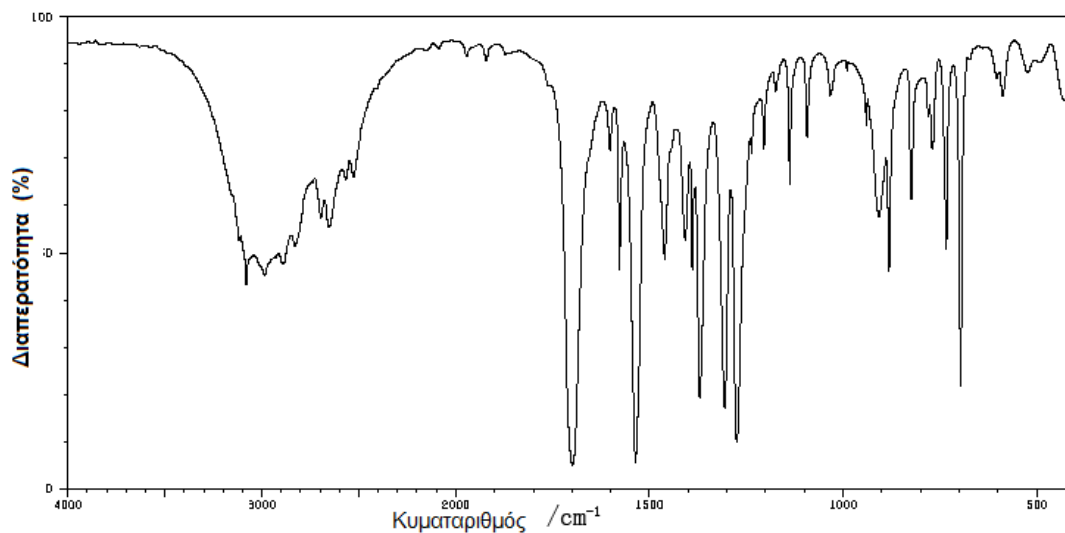
## Ερώτηση

Αρωματική ένωση Α, με Μ.Τ.  $C_7H_7NO_2$  μετατρέπεται με τρία (3) στάδια στην ένωση Δ, όπως φαίνεται στο πιο κάτω διάγραμμα.

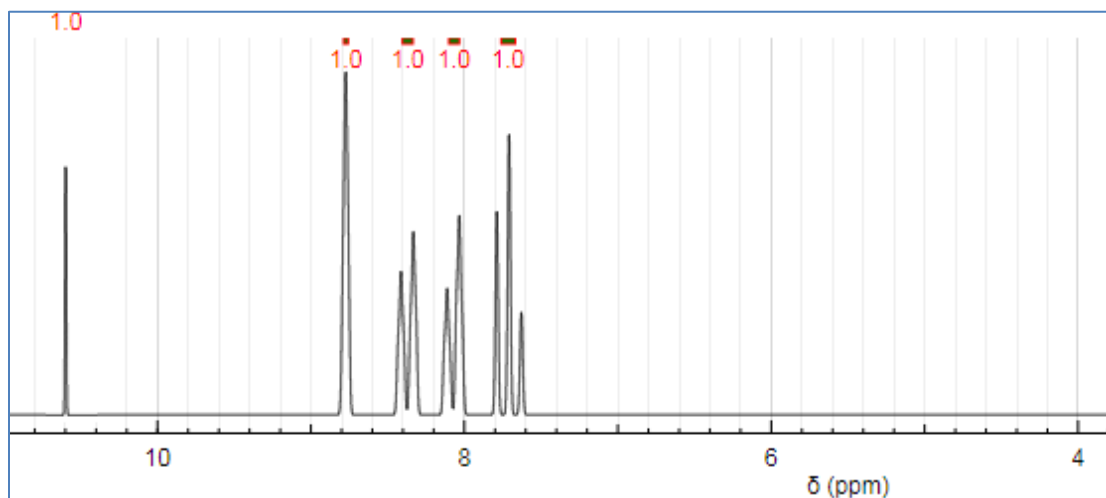


Η ένωση Β, υποβάλλεται σε φασματοσκοπική ανάλυση υπεράυθρου (IR) και  $^1H$ -NMR. Τα φάσματα που προκύπτουν, δίνονται πιο κάτω:

Φάσμα IR της ένωσης Β



Φάσμα  $^1H$ -NMR της ένωσης Β



Να προτείνετε τους Σ.Τ. των ενώσεων Α, Β, Γ και Δ καταγράφοντας όλους τους συλλογισμούς σας και αξιοποιώντας όλα τα δεδομένα.

Προτεινόμενη λύση

- 1 -

(i) Με βάση τον μοριακό τύπο της ένωσης Α  $C_7H_7NO_2$  συμπεραίνεται, ότι η αρωματική οξείδα περιέχει 1 C. και  $-NO_2$ .

(ii) Σύμφωνα με το διάγραμμα, η ένωση Β, η οποία είναι προϊόν οξείδωσης αραμένεται να περιέχει  $-COOH$ .

(iii) Ανάλυση φάσματος IR της ένωσης Β.

- Ισχυρή ευρεία απορρόφηση στα  $3300-2500\text{ cm}^{-1}$ , η οποία ανταποκρίνεται στον δεσμό έκτασης  $O-H$ .

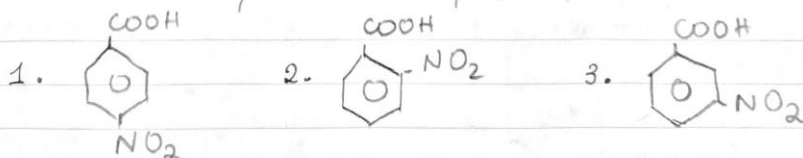
- Ισχυρή απορρόφηση στα  $1725-1700\text{ cm}^{-1}$ , η οποία ανταποκρίνεται στον δεσμό έκτασης  $C=O$ .

- Ισχυρή απορρόφηση στα  $1320-1210\text{ cm}^{-1}$ , η οποία ανταποκρίνεται στον δεσμό έκτασης  $C-O$ .

- Ισχυρή απορρόφηση (δύο κορυφές) στα  $1560-1515$  &  $1385-1345\text{ cm}^{-1}$ , η οποία ανταποκρίνεται στον δεσμό έκτασης  $N-O$ .

Συμπέρασμα - Επιβεβαιώνεται η παρουσία της  $-COOH$  και της  $-NO_2$ .

Η ένωση Β έχει 2 υποκαταστάσεις:  $-COOH$  και  $-NO_2$ . Συνεπώς αραμένονται τρεις (3) Σ.Τ.:



Με βάση τον αριθμό των κορυφών στο φάσμα  $^1H-NMR$  απορρίπτεται ο Σ.Τ. (1).

Στο φάσμα  $^1\text{H-NMR}$  εμφανίζονται 5 κορυφές  $\rightarrow$  5ο μέρος της ένωσης Β περιέχεται 5 διαφορετικά πρωτόνια ως προς το περιβάλλον

	$\delta$ (ppm)	Ποσότητα Ολοκλήρωσης	Πολλαπλότητα	Συμπέρασμα
α)	10,6	1	απλή	1 άτομο H με κατ'ελάχιστον 1 άτομο H σε γειτονικό άνθρακα ή υδρογόνο - <u>COOH</u>
β	8,8	1	απλή	1 άτομο H με κατ'ελάχιστον 1 άτομο H σε γειτονικό C
γ	8,4	1	διπλή	1 άτομο H με 1 άτομο H σε γειτονικό C
δ	8,1	1	διπλή	1 άτομο H με 1 άτομο H σε γειτονικό C
ε	7,7	1	τριπλή	1 άτομο H με 2 άτομα H σε γειτονικούς C

