

**KARADENİZ TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
FEN - EDEBİYAT FAKÜLTESİ
KİMYA BÖLÜMÜ**

**ORGANİK YAPILARIN TANINMASINDA IR VE NMR
SPEKTRUMLARININ ÇÖZÜMLÜ UYGULAMALARI**

HAZIRLAYAN

Doç.Dr.Nurettin YAYLI

TRABZON-1998

ÖNSÖZ

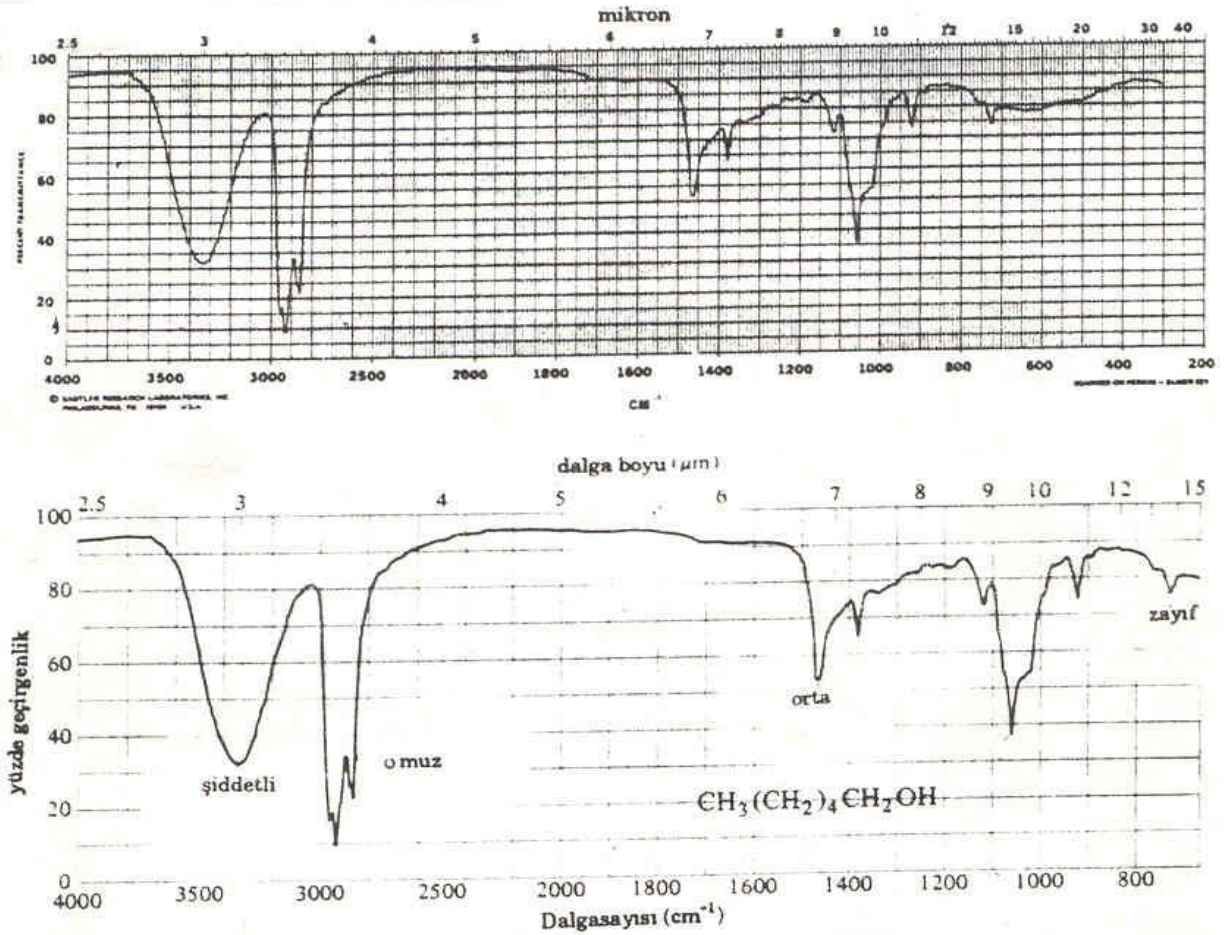
Organik maddelerin yapılarının aydınlatılmasında hiç şüpheş infrared, nmr ve kütle spektrumlarının önemi oldukça fazladır. Organik maddelerinin yapılarının tayininde IR ve NMR en sık kullanılan spektroskopik tekniklerdir. Öğrencilerin isteęi üzerine, organik maddelerinin yapılarını aydınlatmak üzere kullandığımız bu tekniklerin uygulamalarını çözümleriyle beraber hiçbir ticari amaç güdmeksizin kaynaklarda belirtilen ders kitaplarından spektrumlar alınarak ve gerekli düzenlemelerden sonra alıştırınaların çözümleri yapıp sonuna eklenmiştir. Bu IR ve NMR uygulamaları notlarının Organik laboratuvarı , Seçmeli dersler (Organik analiz, spektroskopiye giriş, gibi), Enstrümental analiz derslerinde öğrencilerimize yardımcı olacağı ümidiyle tüm öğrencilerimize başarılar dilerim.

Doç.Dr.Nurettin YAYLI

İÇİNDEKİLER

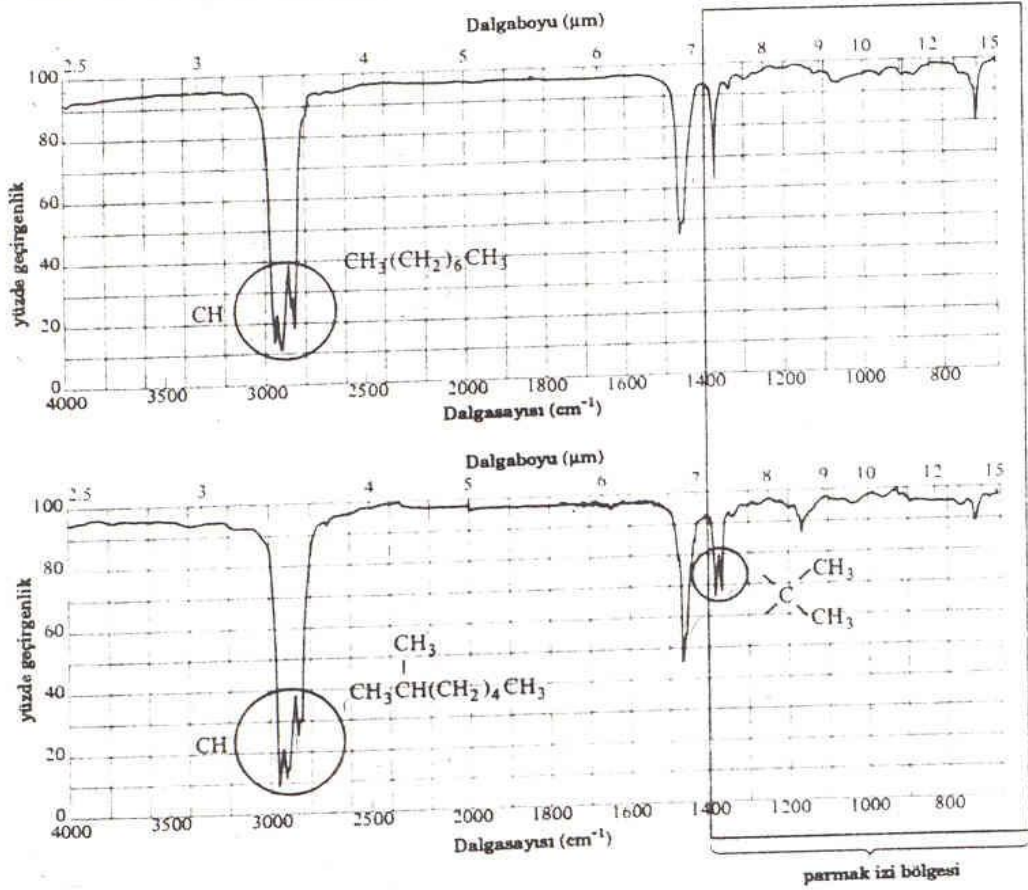
	Sayfa No
1. İnfrared Spektrumları.....	1
2. Karbon-Karbon ve Karbon Hidrojen IR Değerleri.....	2
3. Substitüe Benzenlerin Spektrumları.....	5
4. Haloalkanlar.....	7
5. Eterler.....	10
6. Karbonil Bileşikleri.....	11
7. Aldehit ve Ketonlar.....	14
8. Karboksilli Asit Türevleri.....	16
9. Asit Klorürler.....	16
10. Anhidritler.....	17
11. Esterler.....	17
12. Nitriller.....	18
13. Nükleer Magnetik Rezonans Spektroskopisi	
Proton NMR Spektrumları.....	19
14. ^{13}C NMR Spektrumu.....	43
15. Organik Yapıların Tanınmasında İnfrared ve NMR	
Spektrumlarının Kullanılması.....	47
16. Alıştırmaların Cevapları.....	82
17. Kaynaklar.....	88

İnfrared Spektrumları



Şekil 1- 1-Hekzanolün infrared spektrumları. Üstteki spektrum gerçek bir spektrumun kopyası, alttaki ise çizimdir. Üstteki spektrum Sadtler Research Laboratories, Division of Bio-Rad Laboratories, Inc., 1986 den alınmıştır.

Karbon-Karbon ve Karbon-Hidrojen



Şekil 2 n-Oktan ve 2-metilheptan'ın parmakizi bölgelerinde çok az farklılıklar gösteren infrared spektrumları. CH soğurma piklerine de dikkat ediniz.

$\text{sp}^2 \text{C} = \text{C}$: 1600-1700 cm^{-1} (5.8-6.2 μm)

$\text{sp}^2 \text{C} - \text{C}$ (aril) : 1450-1600 cm^{-1} (6.25-6.9 μm)

$\text{sp} \text{C} \equiv \text{C}$: 2100-2250 cm^{-1} (4.4-4.8 μm)

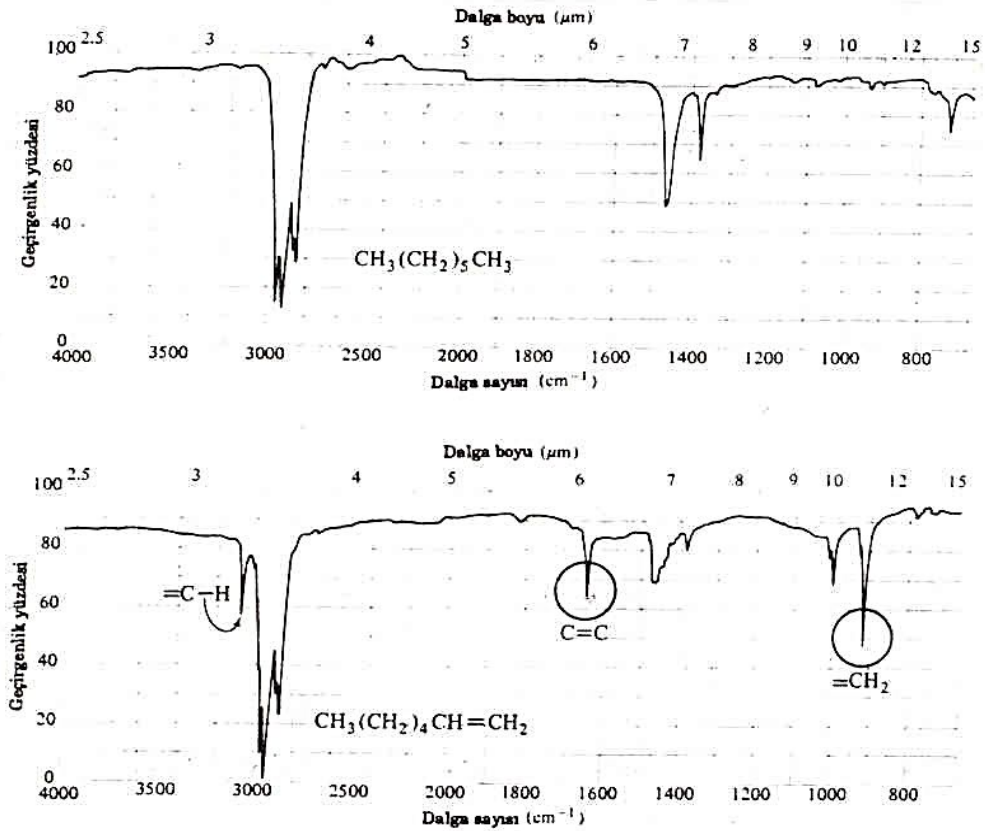
$\text{sp}^3 \text{C-H}$ (alkanlar ya da alkil grupları) : 2800-3000 cm^{-1} (3.3-3.6 μm)

$\text{sp}^2 \text{C-H}$ (= CH-) : 3000-3300 cm^{-1} (3.0-3.3 μm)

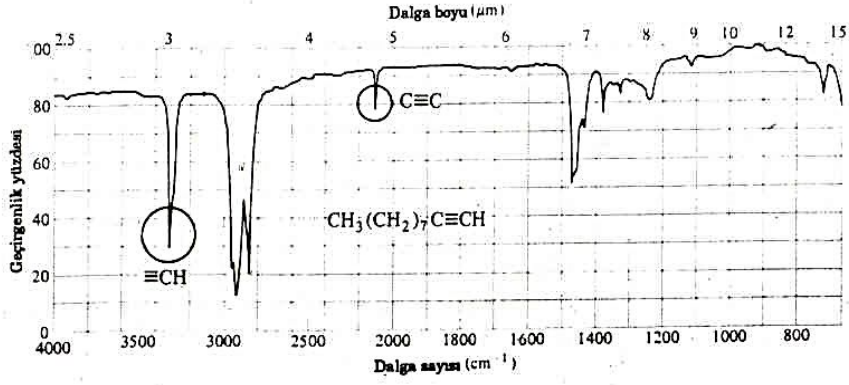
$\text{sp} \text{C-H}$ ($\equiv \text{CH}$) : 3300 cm^{-1} (3.0 μm)

Çizelge 1 Alken ve Alkinlerin IR Soğurma Karakteristikleri

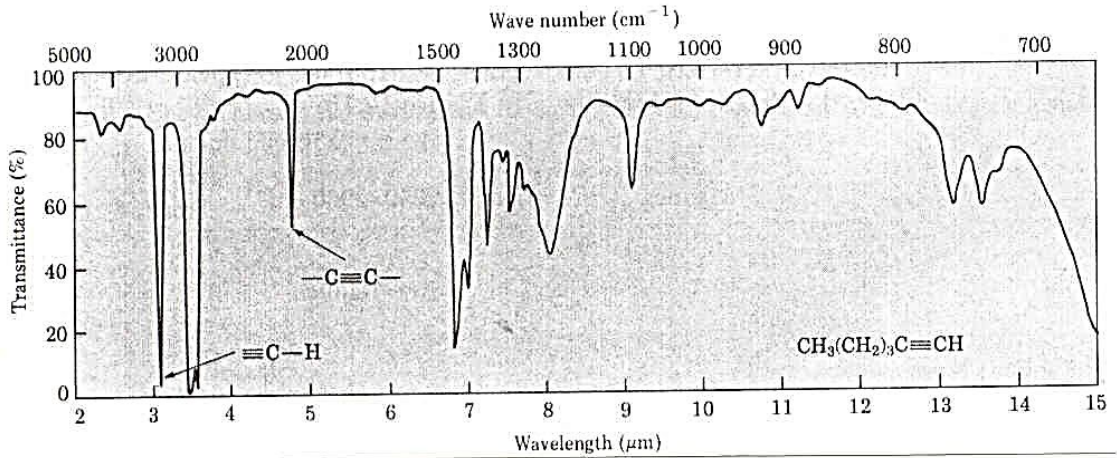
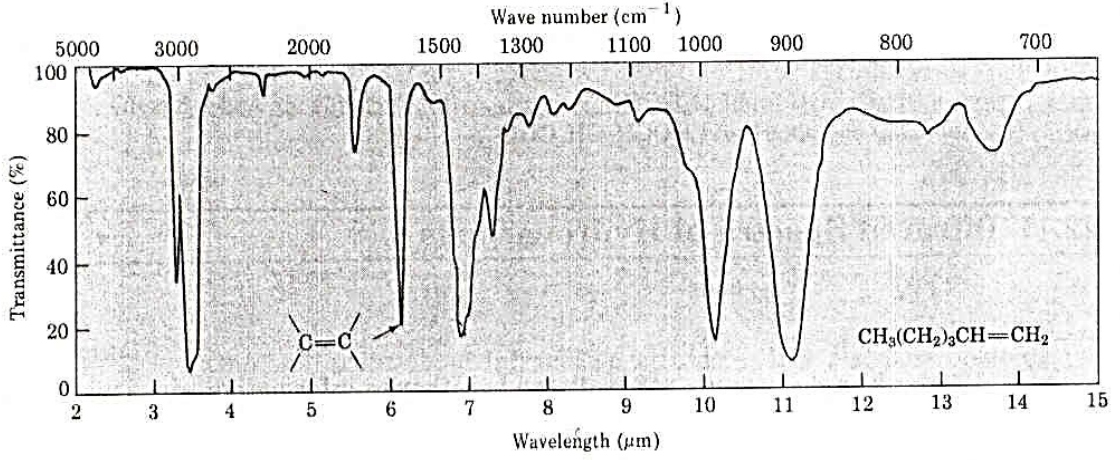
Titreşim	Soğurma konumları	
	cm^{-1}	μm
Alkenler:		
= C-H gerilme	3000-3100	3.2-3.3
=C-H bükülme	800-1000	10.0-12.5
=CH ₂ bükülme	855-995	10.0-11.7
C=C gerilme	1600-1700	5.8-6.2
Alkinler:		
$\equiv$ C-H	3300	3.0
C $\equiv$ C	2100-2250	4.4-4.8



Şekil 3 Heptan ve 1-hepten'in IR spektrumları



Şekil 5 1-desin'in IR spektrumu



Şekil 6 1-Hekzen ve 1Hekzin ' in IR spektrumları

Sübstitüe Benzenlerin Spektrumları

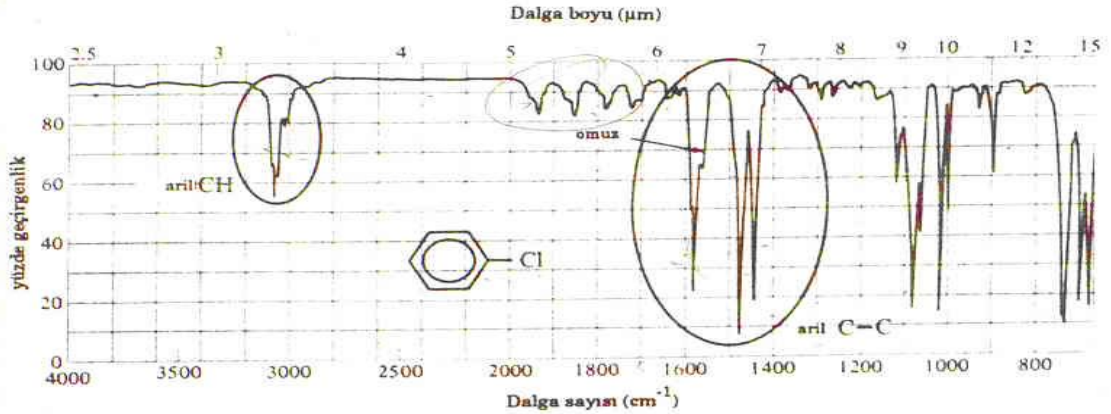
Çizelge 2 Benzen bileşiklerinin infrared soğurma karakteristikleri

Titreşim tipi	Soğurmanın konumu	
	cm^{-1}	μm
aril C—H	3000–3300	3.0–3.3
aril C—C (dört pik)	1450–1600	6.25–6.9

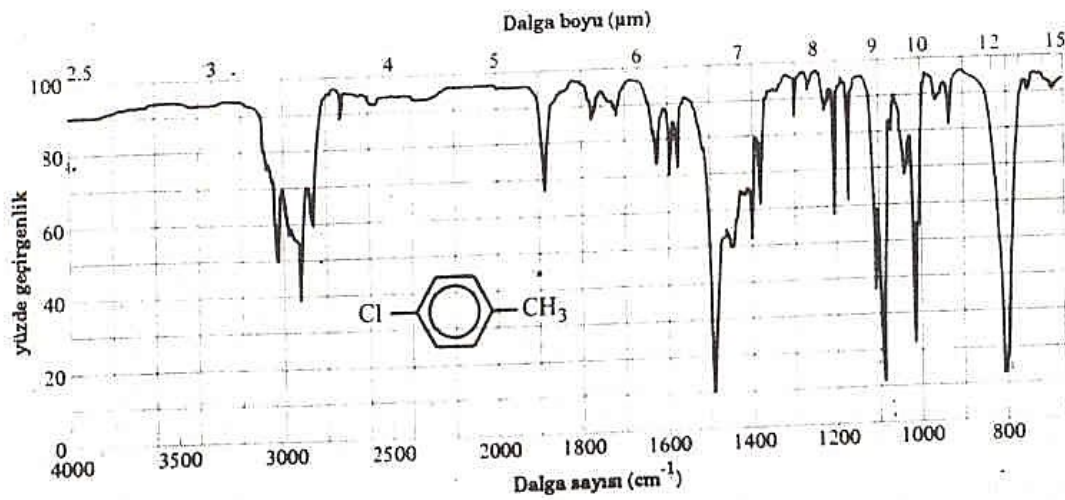
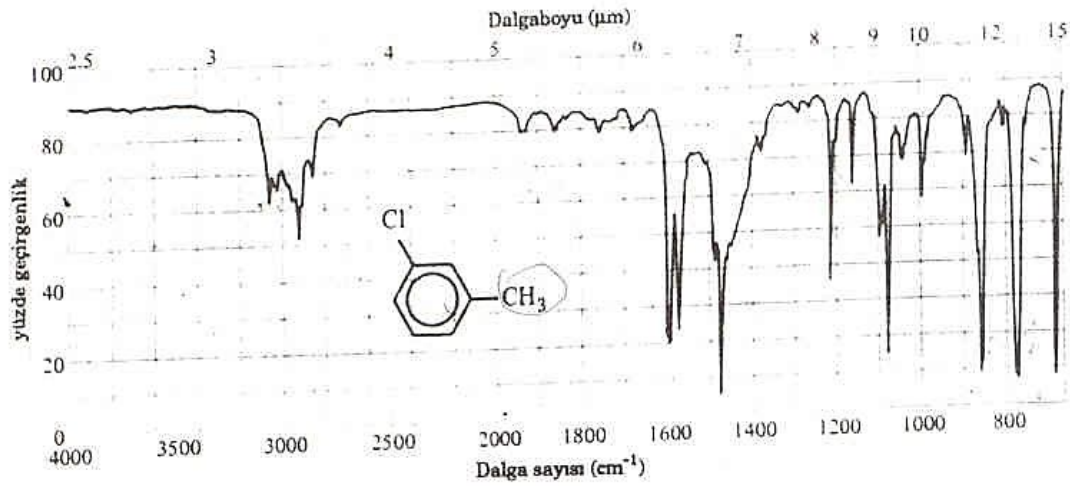
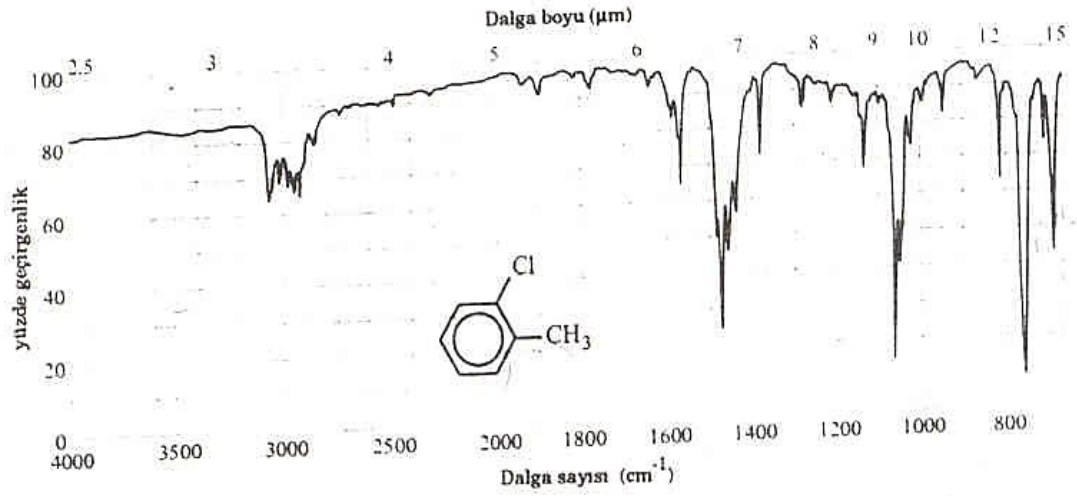
Çizelge 3 Sübstitüe benzenlerin C - H bükülme soğurmaları

Sübstitüsyon	Görünüş	Soğurmanın Konumu	
		cm^{-1}	μm
monosübstitüe,		iki pik 730–770 690–710	12.9–13.7 14.0–14.5
o-disübstitüe,		bir pik ^a 735–770	12.9–13.6
m-disübstitüe,		üç pik 860–900 750–810 680–725	11.1–11.6 12.3–13.3 13.7–14.7
p-disübstitüe,		bir pik 800–860	11.6–12.5

^a Ek bant genelde 680 cm^{-1} (14.7 μm)'de gözlenir.

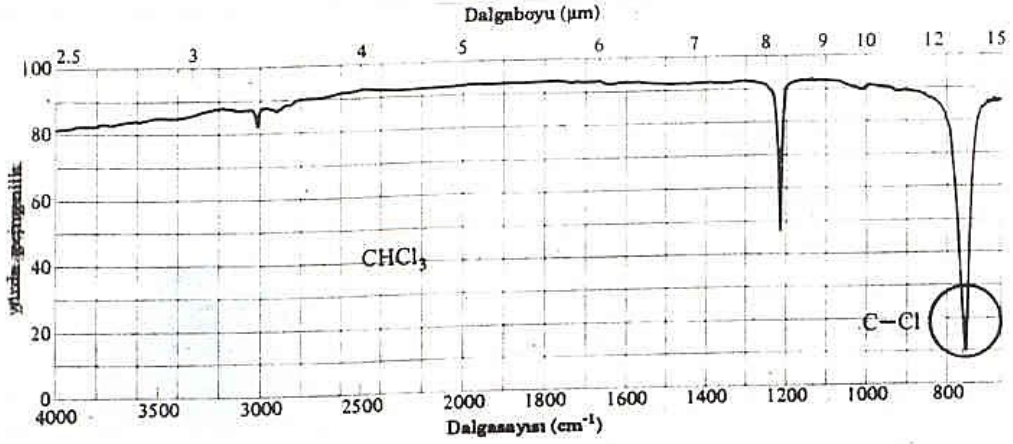


Şekil 7 Klorbenzenin infrared spektrumu



Şekil 8 o-, m-, ve p-klortoluen için İnfrared spektrumu.

Haloalkanlar

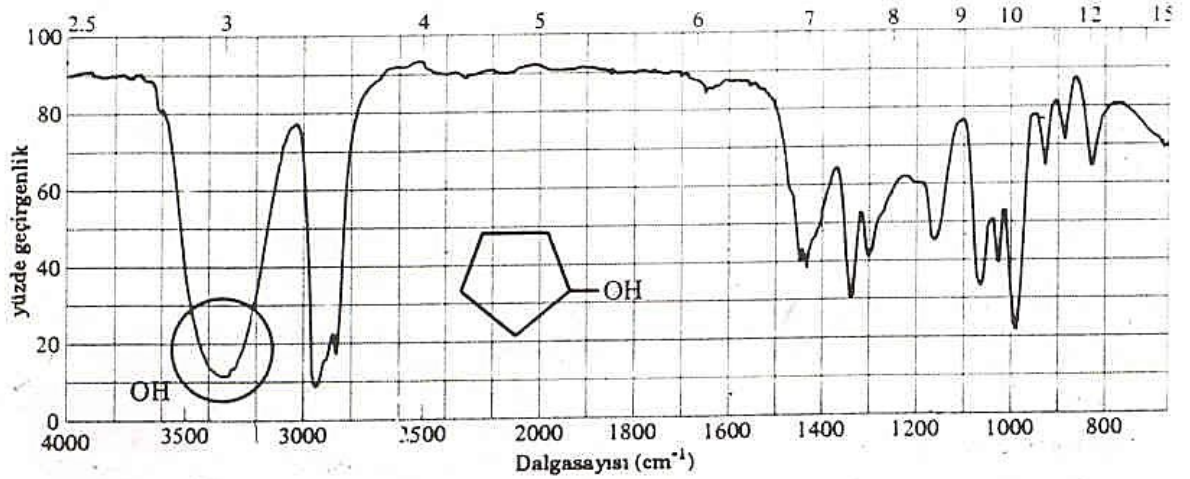


Şekil 9 Bir trihaloalkan olan kloroformun infrared spektrumu

Alkoller ve Aminler

OH ya da NH : 3000-3700 cm⁻¹ (2.7-3.3 μm)

C-O ya da C-N : 900-1300 cm⁻¹ (8-11 μm)



Şekil 10 Bir alkol olan siklopentanol'ün infrared spektrumu

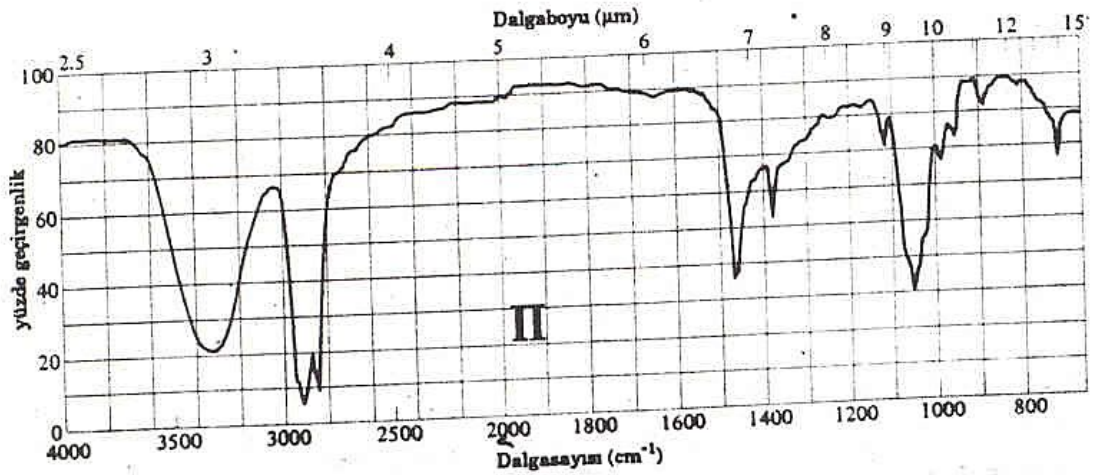
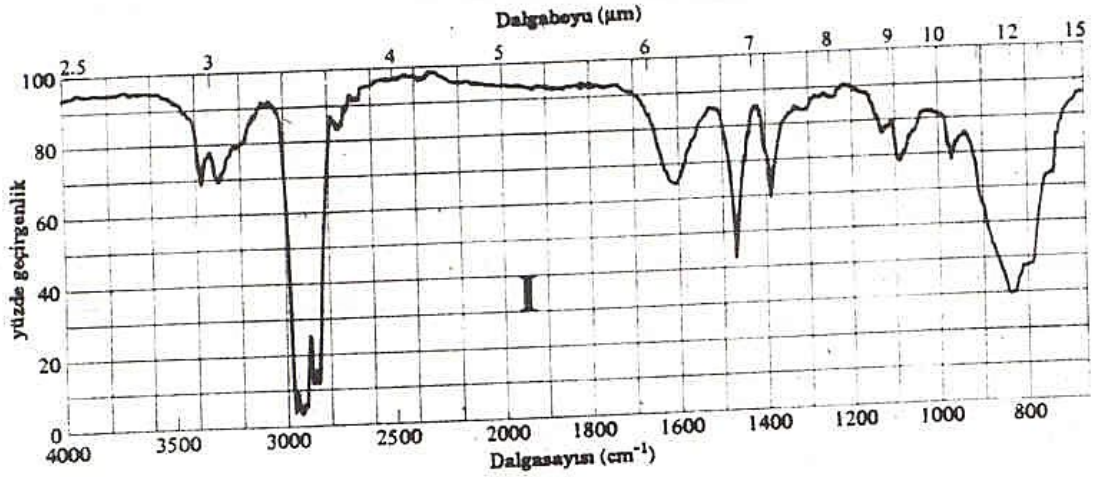
Alıştırma

1

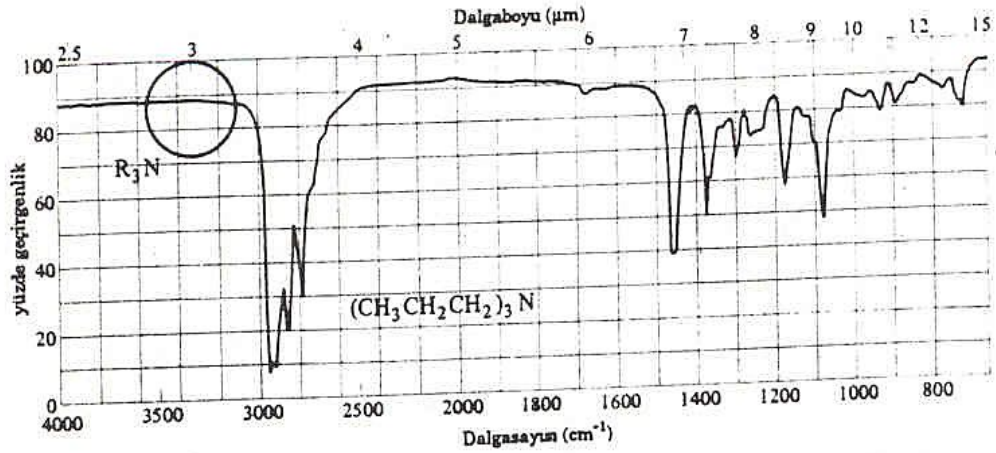
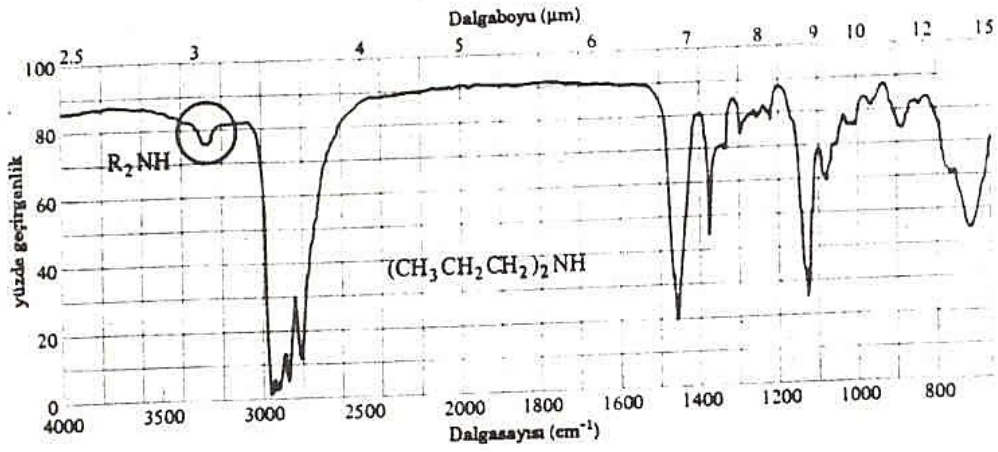
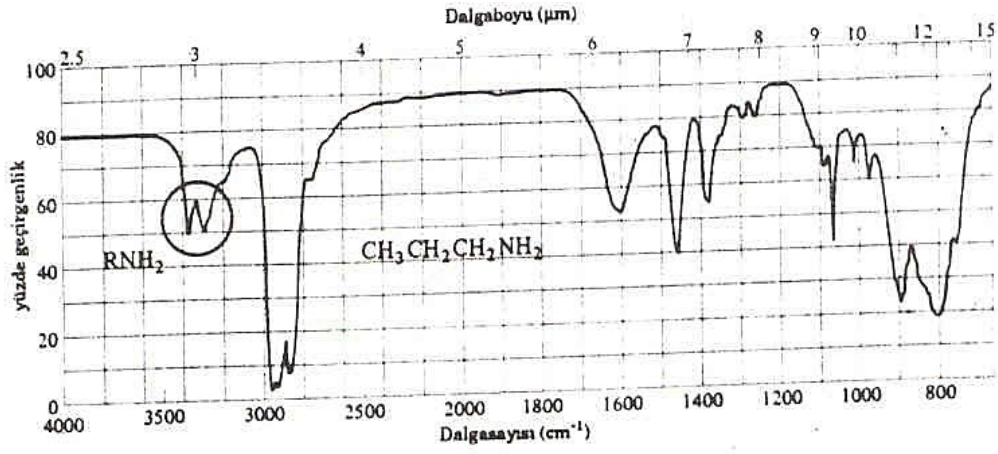
Şekil 11 her ikisi de aşağıdaki listede bulunan I ve II bileşiklerinin infrared spektrumlarını vermektedir. Hangisi I hangisi II'dir?

- (a) $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$ (b) $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_2\text{OH}$ (c) $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{N}(\text{CH}_3)_2$
 (d) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ (e) $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_2\text{I}$ (f) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHCH}_3$

Dalgaboyu (μm)

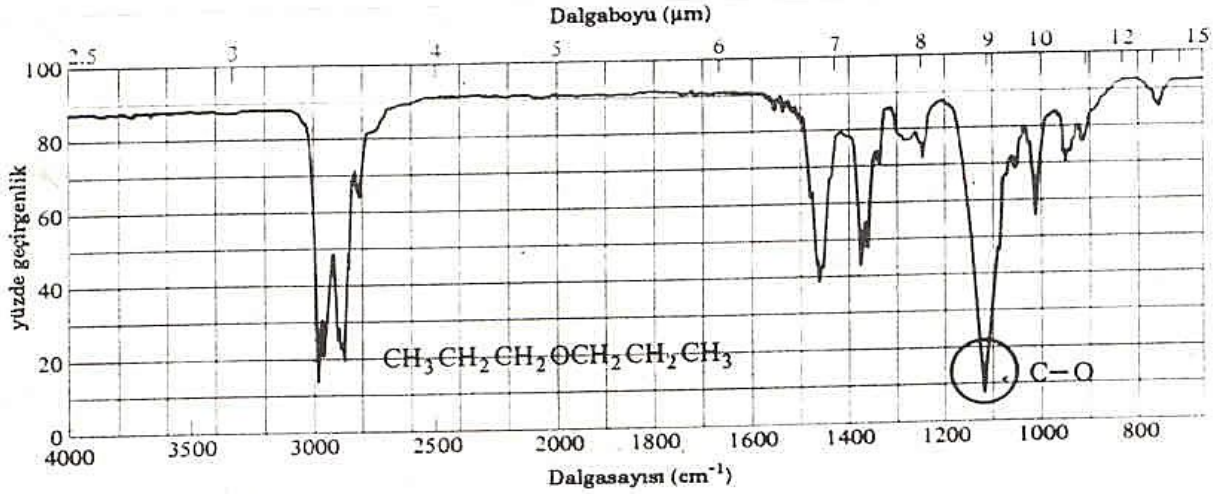


Şekil 11 Soru 1 için infrared spektrumları



Şekil 12 Bir birincil amin, n-propilamin (üstte); bir ikincil amin, dipropilamin (ortada); ve bir üçüncül amin, tripropilamin'in infrared 'spekt. rumları

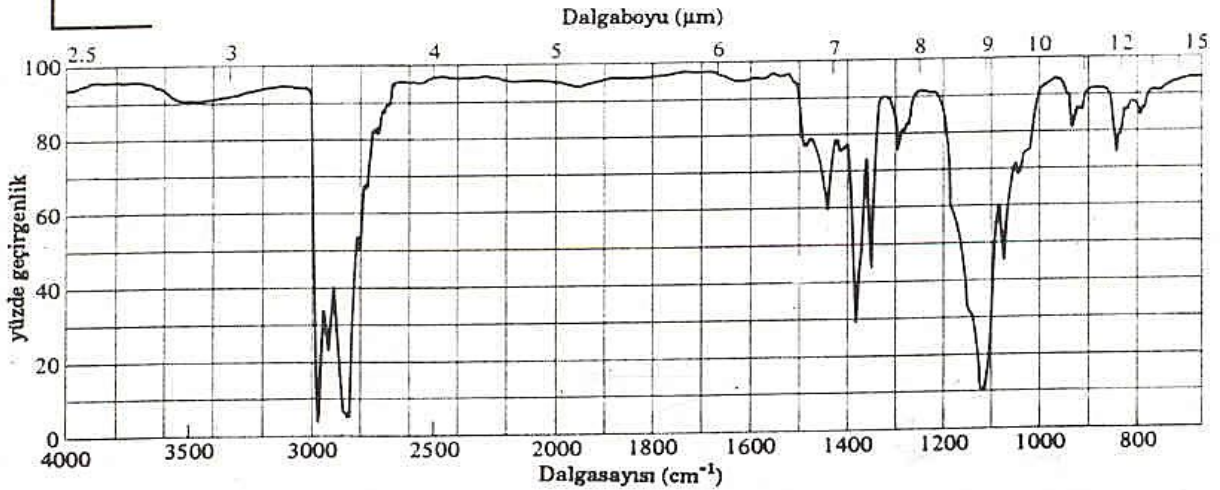
Eterler



Şekil 13 Bir eter olan di-n-propil eter'in infrared spektrumu

Alıştırma

2. Bir bileşik HI ile ısıtıldığı zaman ürün olarak yalnızca iyodetan vermektedir. Başlangıç bileşiğinin infrared spektrumu Şekil 14 te gösterilmiştir. Bileşiğin yapısı nedir? Belli başlı spektral bandları niteleyin.



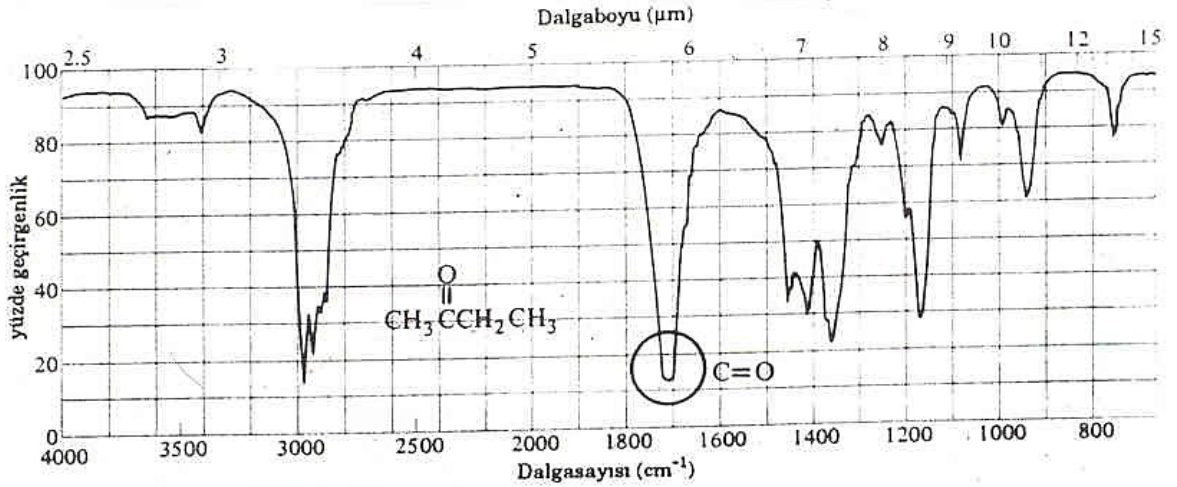
Şekil 14 Soru 2'deki bilinmeyen bileşik için infrared spektrumu

Karbonil Bileşikleri

Çizelge 4 Bazı karbonil bileşikleri için gerilme titreşimleri^a

Bileşik Çeşidi	Soğurma Konumu	
	cm^{-1}	μm
aldehit, $\text{RCH}=\text{O}$	1720-1740	5.75-5.81
keton, $\text{RCR}=\text{O}$	1705-1750	5.71-5.87
karboksilik asit, RCOOH	1700-1725	5.80-5.88
ester, RCOR	1735-1750	5.71-5.76

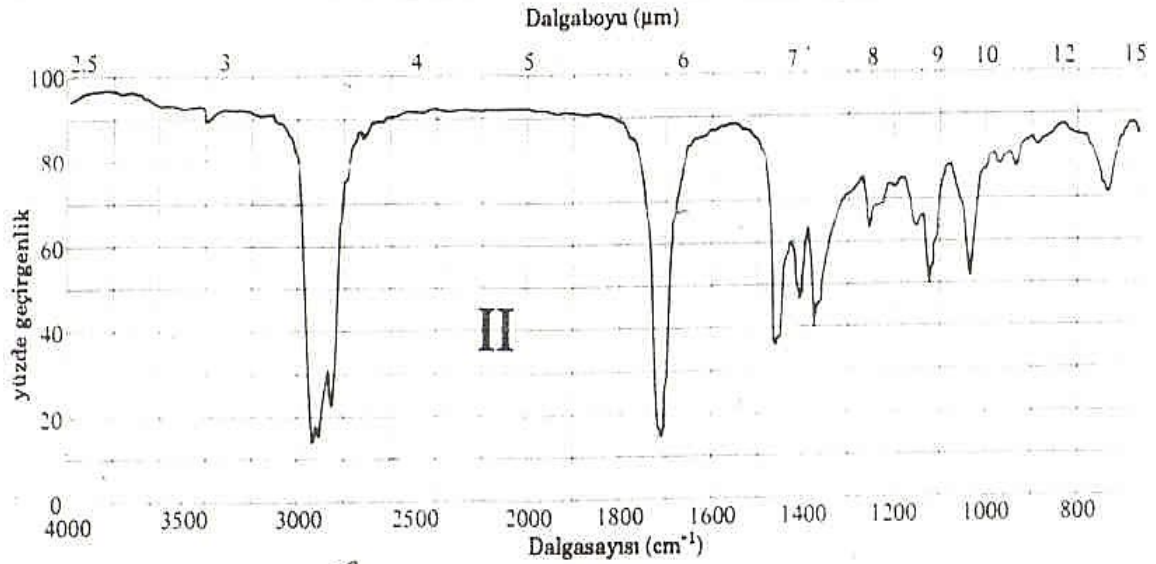
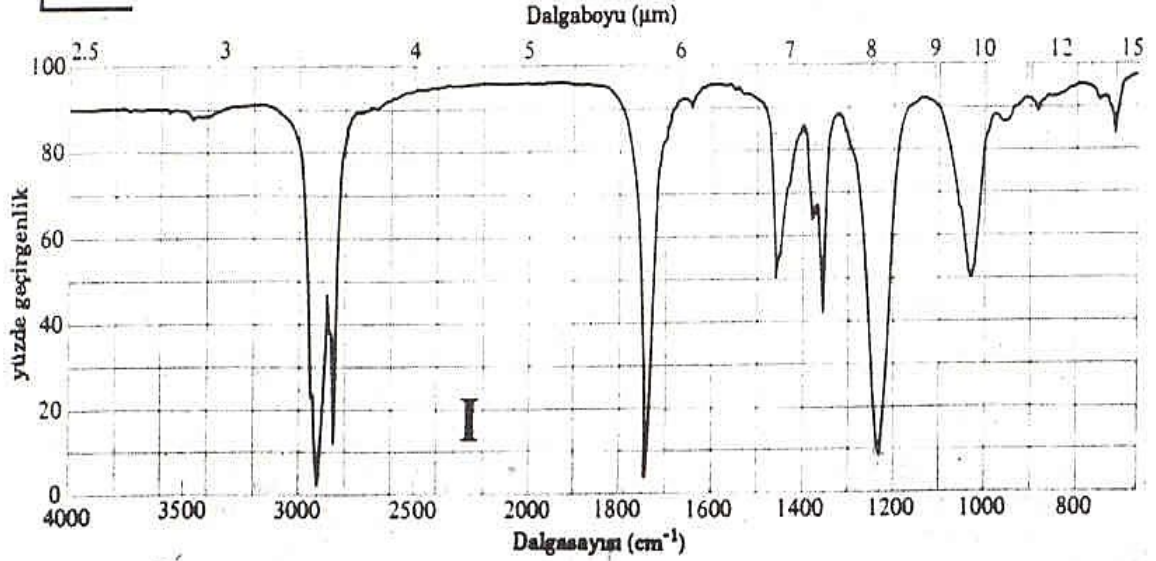
^a Her durumda, R doymuş ve alifatiktir. Halka gerginliği, konjugasyon, ve diğer sübtütientleri bulunan bileşikler verilen soğurma aralığının dışına düşebilir.



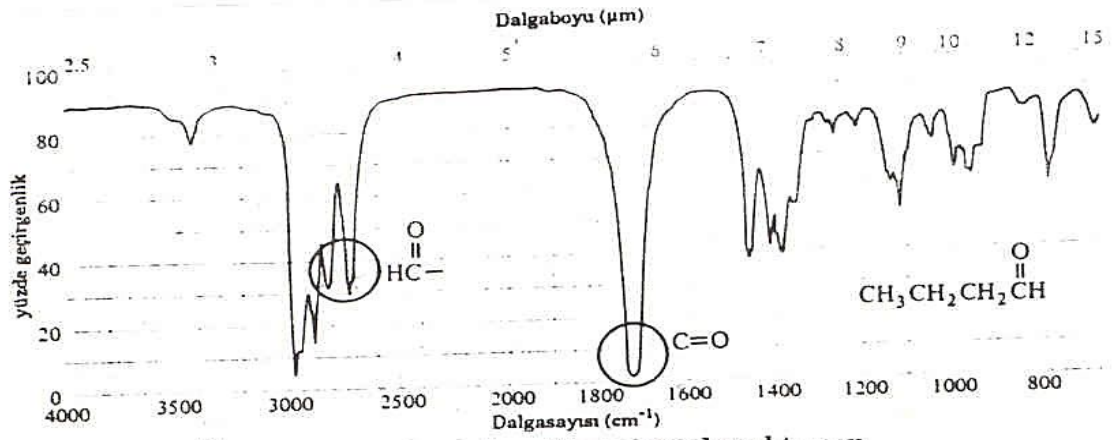
Şekil 15 Bir keton olan bütanon'un infrared spektrumu

Alıştırma

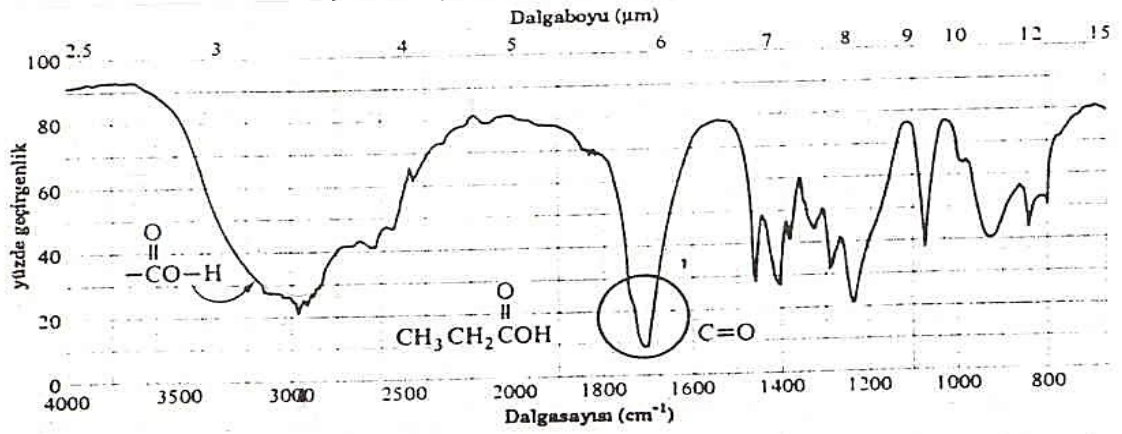
3 Şekil 16 daki iki spektrumdan biri bir ketona; diğeri bir estere ilişkindir. Hangisi hangisininidir? Yanıtınızı açıklayınız.



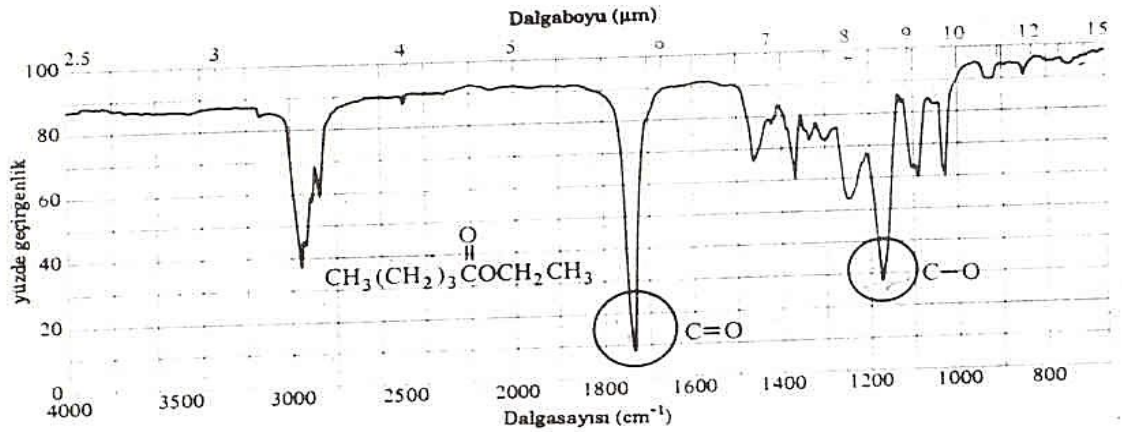
Şekil 16 Soru 3'deki bilinmeyen bileşiklerin infrared spektrumları



Şekil 17 Bir aldehit olan bütanal'in infrared spektrumu



Şekil 18 Bir karboksilli asit, propanoik asidin infrared spektrumu



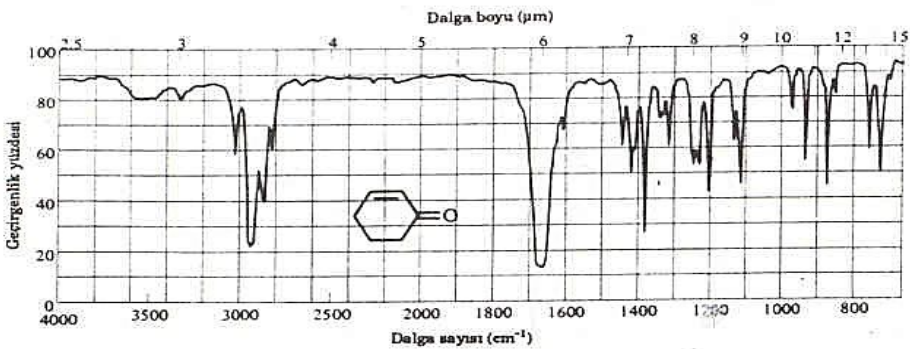
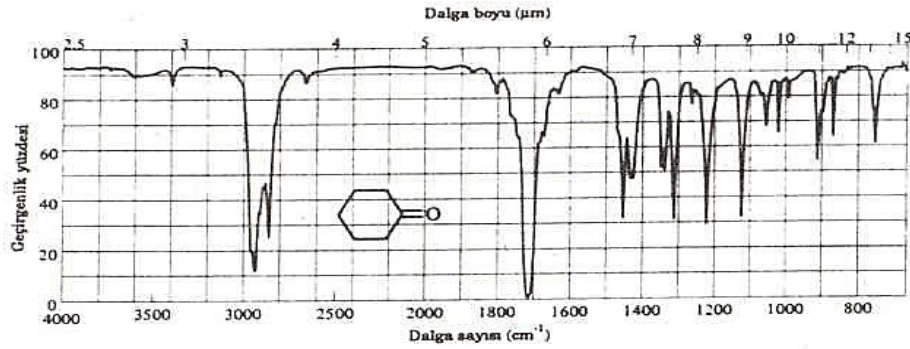
Şekil 19 Bir ester olan etil pentanoat'ın infrared spektrumu

Aldehit ve Ketonlar

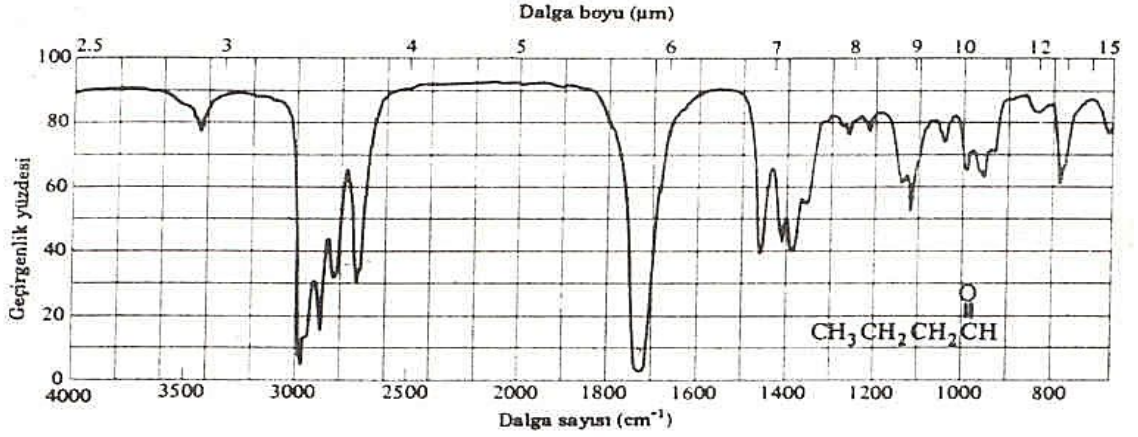
Çizelge 5 Aldehit ve ketonların karakteristik ir soğurmaları

titreşim tipi	Soğurmanın yeri ^a	
	cm^{-1}	μm
Aldehitler:		
- CHO 'in C - H gerilimi	2700 - 2900	3.45 - 3.7
C = O gerilimi	1700 - 1740	5.7 - 5.9
Ketonlar:		
C = O gerilimi	1660 - 1750	5.7 - 6.0

^a Diğer substitüenler ve halka gerilimi karbonil soğurmasının listede verilen sınırların dışına çıkmasına neden olur.



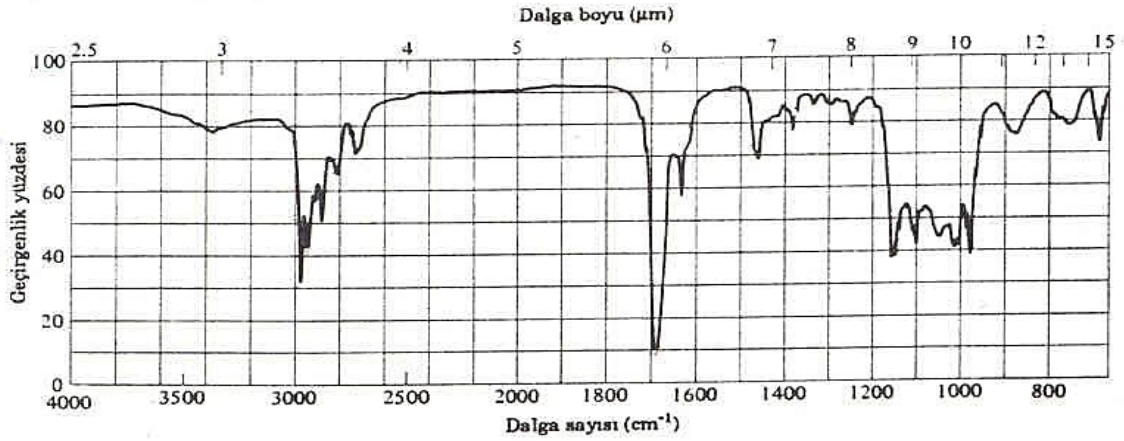
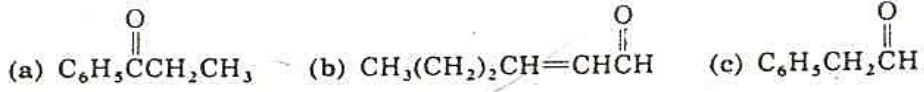
Şekil 20 sikloheksanon ve 2- sikloheksenon'un İR spektrumları. Konjugasyonda C = O soğurmasının biraz daha düşük frekansa (daha uzun dalga boyuna) kaydığı görülmektedir.



Şekil 21 butanal'in IR spektrumu

Alıştırma

4 Şekil 22 teki IR spektrumu aşağıdaki bileşiklerden hangisinin olabilir?



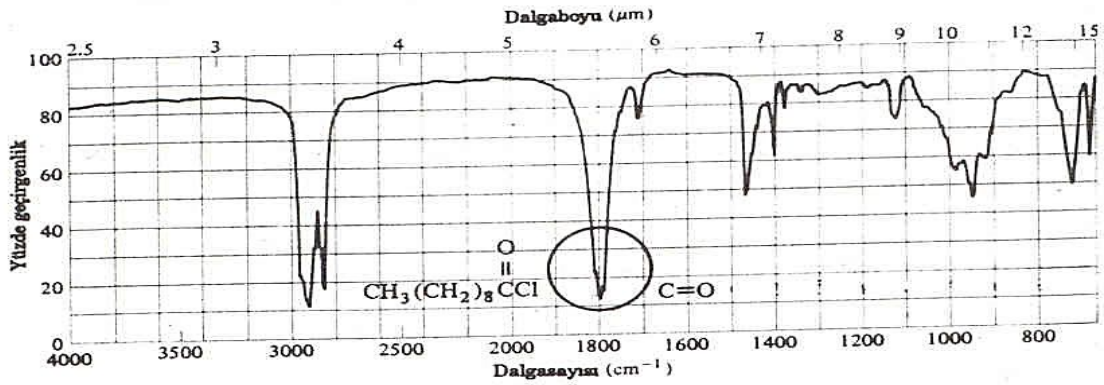
Şekil 22 Soru 4 'e ait IR spektrumu

Karboksilli Asit Türevleri

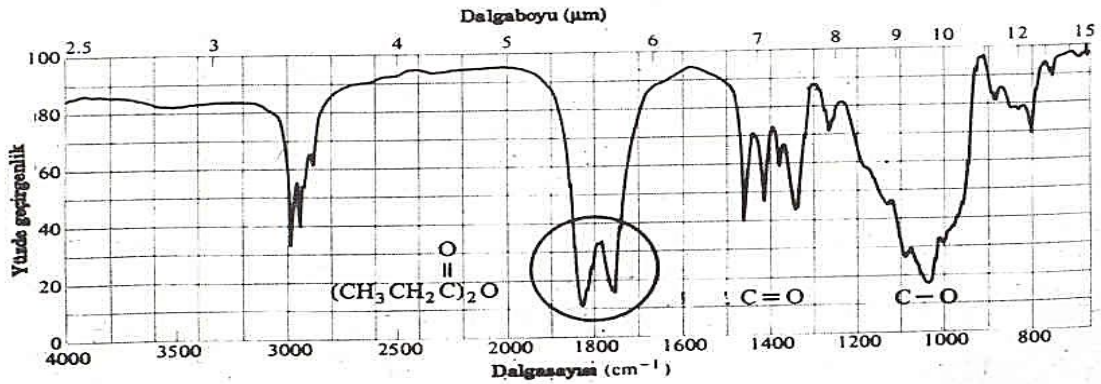
Çizelge 6 Karboksilli asit türevlerinin karbonil pikleri

Sınıf	Yapı	Söğurma bölgesi	
		cm^{-1}	μm
asit klorür	$\text{R}\overset{\text{O}}{\parallel}\text{CCl}$	1785 1815	5.51 5.60
asit anhidrit	$\text{R}\overset{\text{O}}{\parallel}\text{C}\overset{\text{O}}{\parallel}\text{CR}$	1740 1840 (genellikle iki pik)	5.45 5.75
ester	$\text{R}\overset{\text{O}}{\parallel}\text{COR}$	1740	5.75
amit	$\text{R}\overset{\text{O}}{\parallel}\text{CNH}_2$	1630 1700	5.9 6.0

Asit Klorürleri



Şekil 23 Dodesil klorürün IR spektrumu

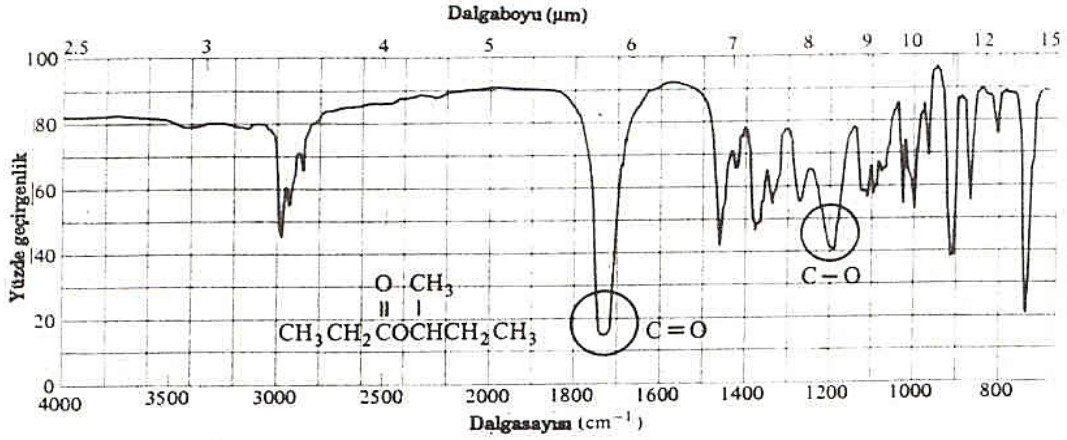


Şekil 24 Propionik anhidritin IR spektrumu

Anhidritler

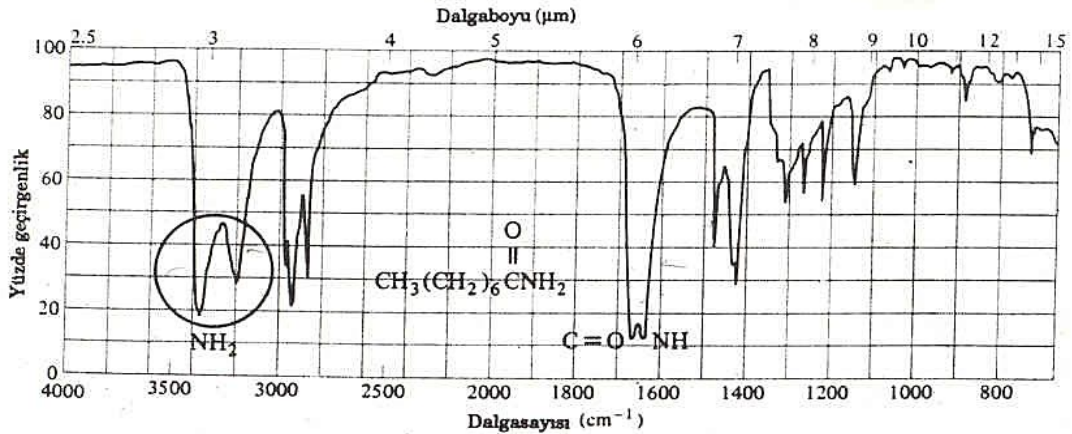
Bir karboksilli asit anhidriti IR spektrumunda genellikle *çift karbonil piki* (iki C = O grubu nedeniyle) verir. Anhidritler ayrıca 1100 cm⁻¹ (9 µm) dolayında C-O gerilme soğurmasına sahiptir. Şekil 15.3 de bir anhidritin IR spektrumu görülmektedir.

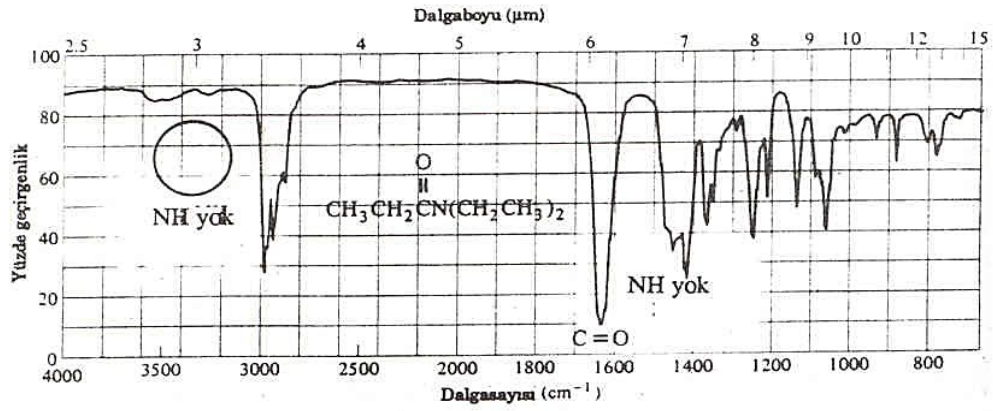
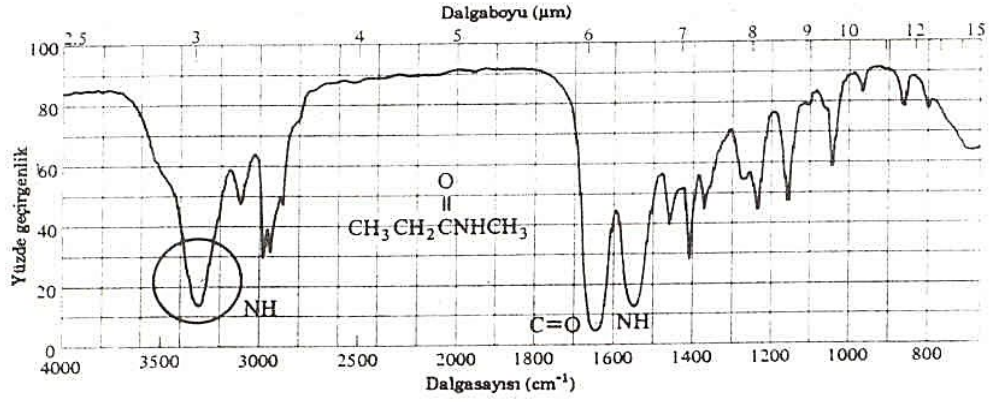
Esterler



Şekil 25: sec-Butil propiyonat'ın IR spektrumu

Amitler

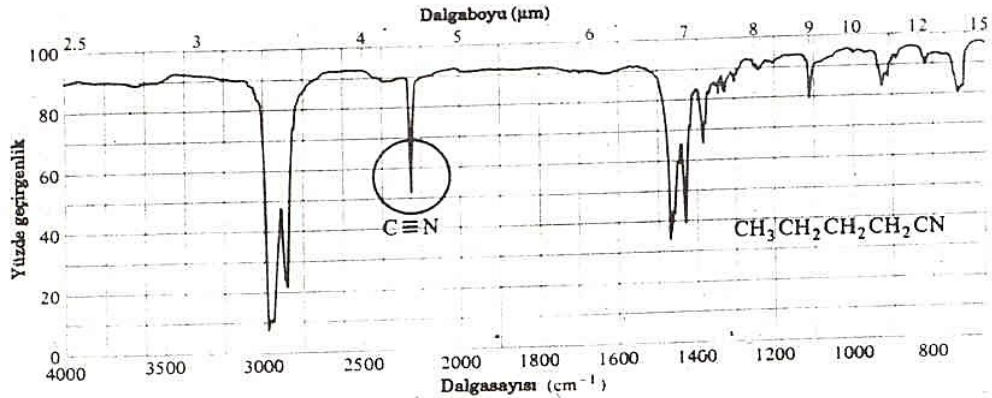




Şekil 26 1° amit (üstte), 2° amit (ortada) ve 3° amidin (altta) İR spektrumu

Nitriller

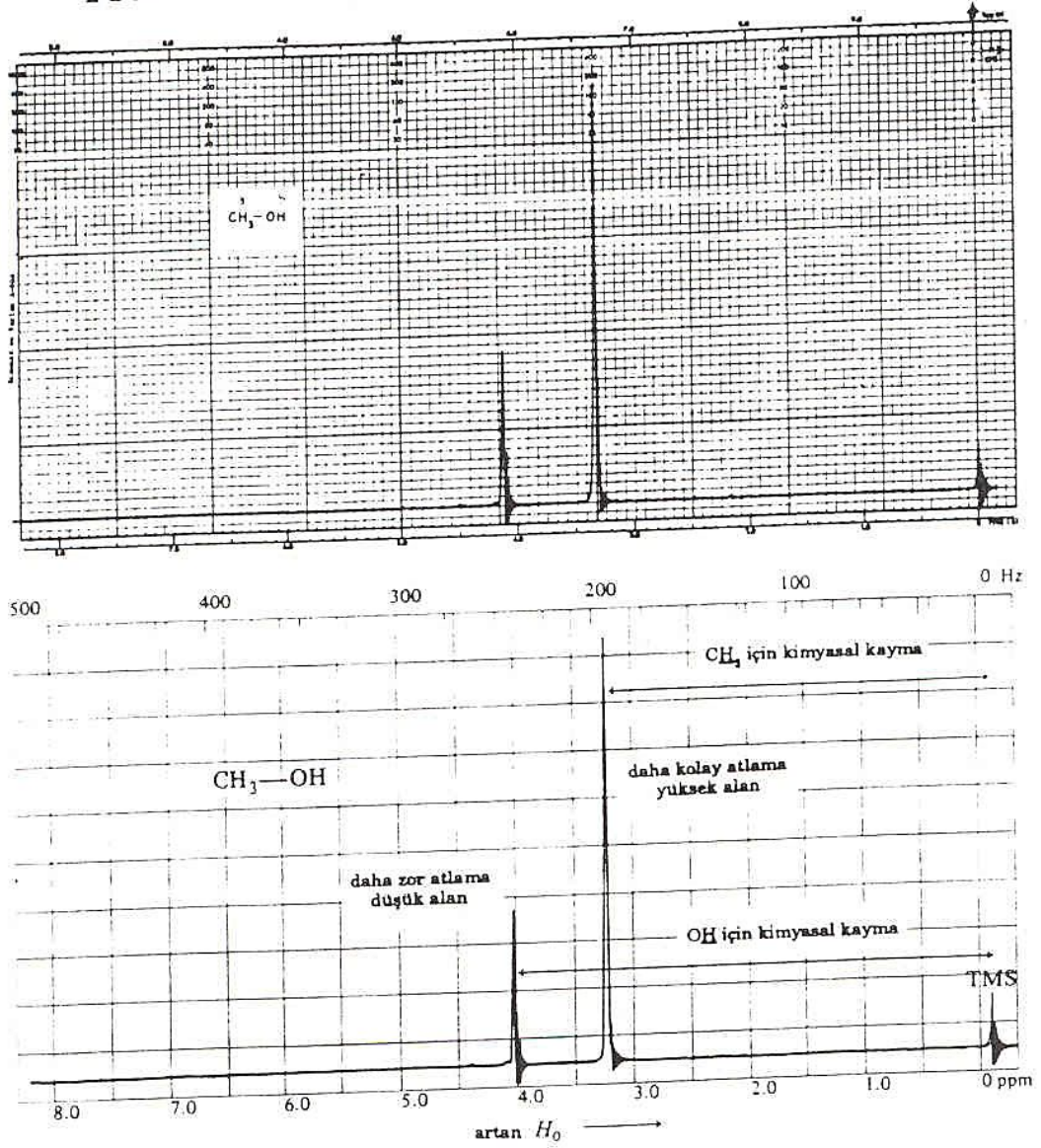
C ≡ N soğurması IR spektrumunun üçlü bağ bölgesinde olup (2200-2300 cm⁻¹ ; 4,3-4,5 μm) orta ya da zayıf şiddettedir (Şekil 27).



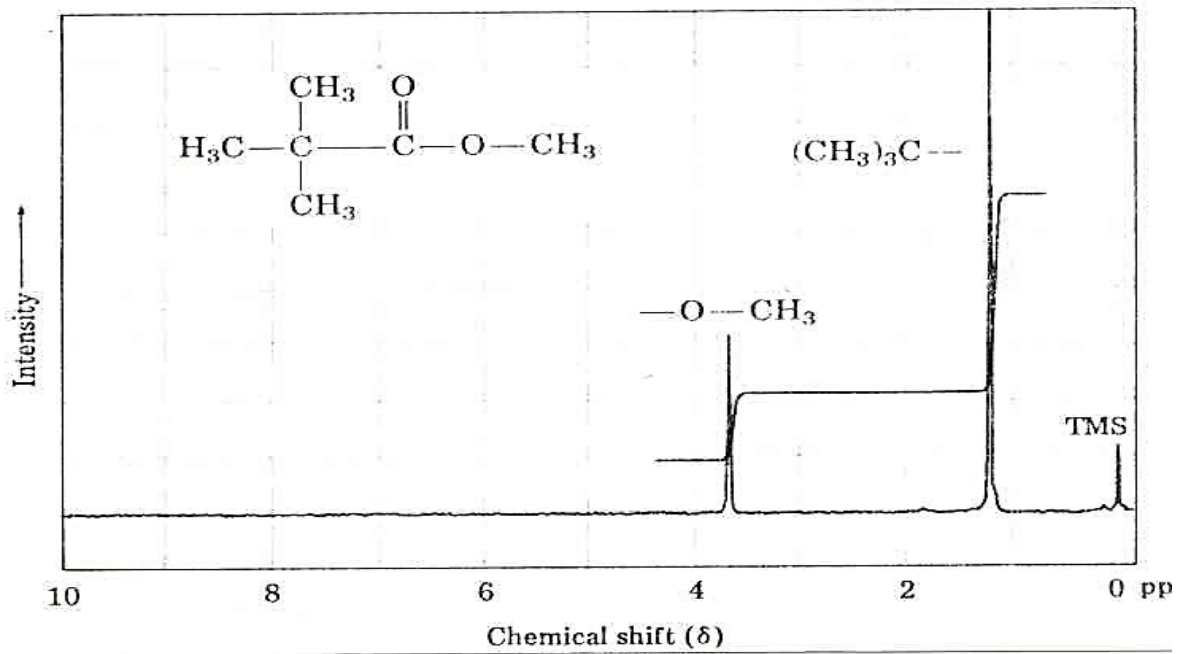
Şekil 27 Pentannitrilin İR spektrumu

Nükleer Magnetik Rezonans Spektroskopisi

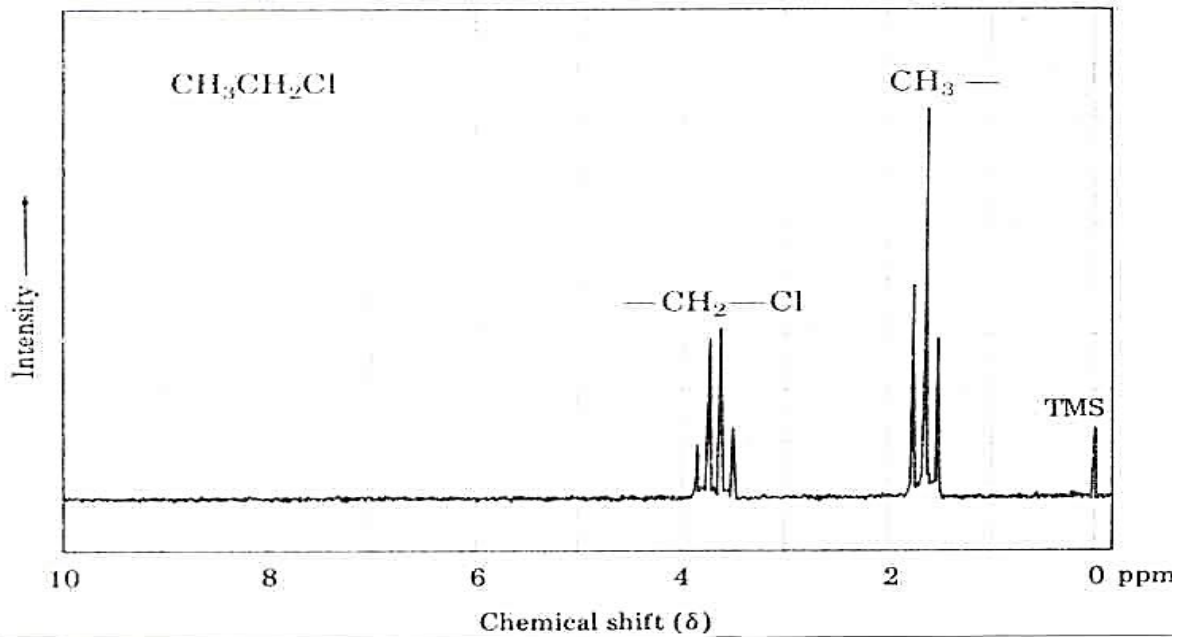
Proton Nmr Spektrumları



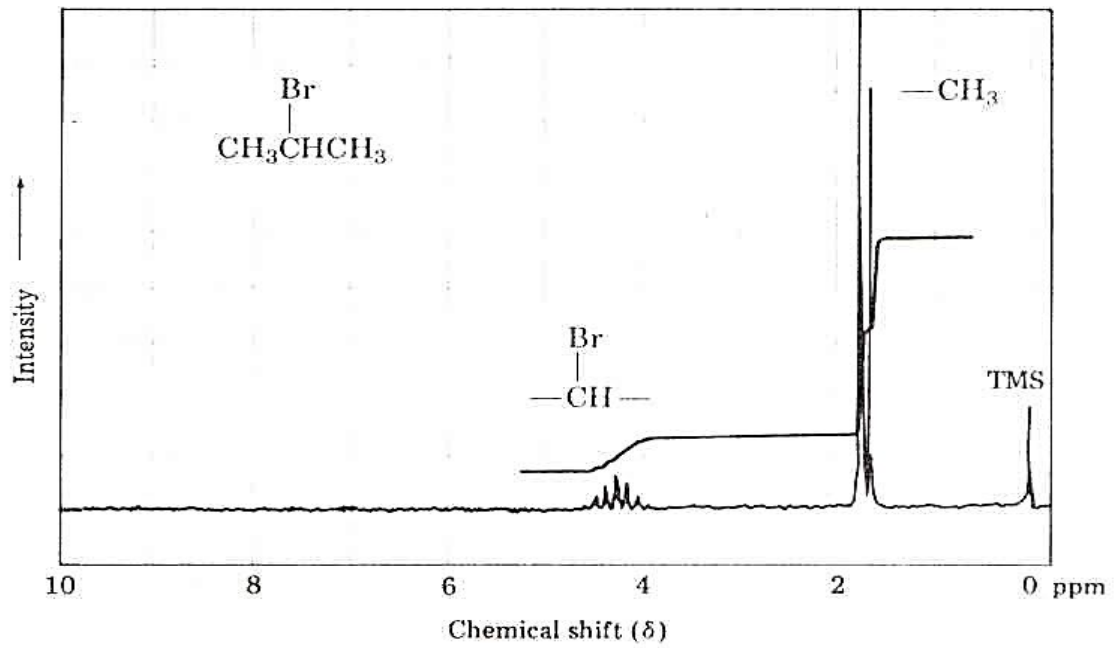
Şekil 28. Metanol'ün ^1H nmr spektrumları (çözücü, CCl_4). Üstteki spektrum gerçek bir spektrumun bir kopyası, alttaki ise bunun bir çizimidir. Altteki spektrum alan taramasını ve kimyasal kaymaları gösterir. (Her bir sinyalin sağındaki değişimler halkalanma diye bilinir, örnek hızlı tarama olduğu zaman manyetik alanın değişmesinden ileri gelir. Halkalanma düzeneğin doğru ayarlandığının bir göstergesidir.)



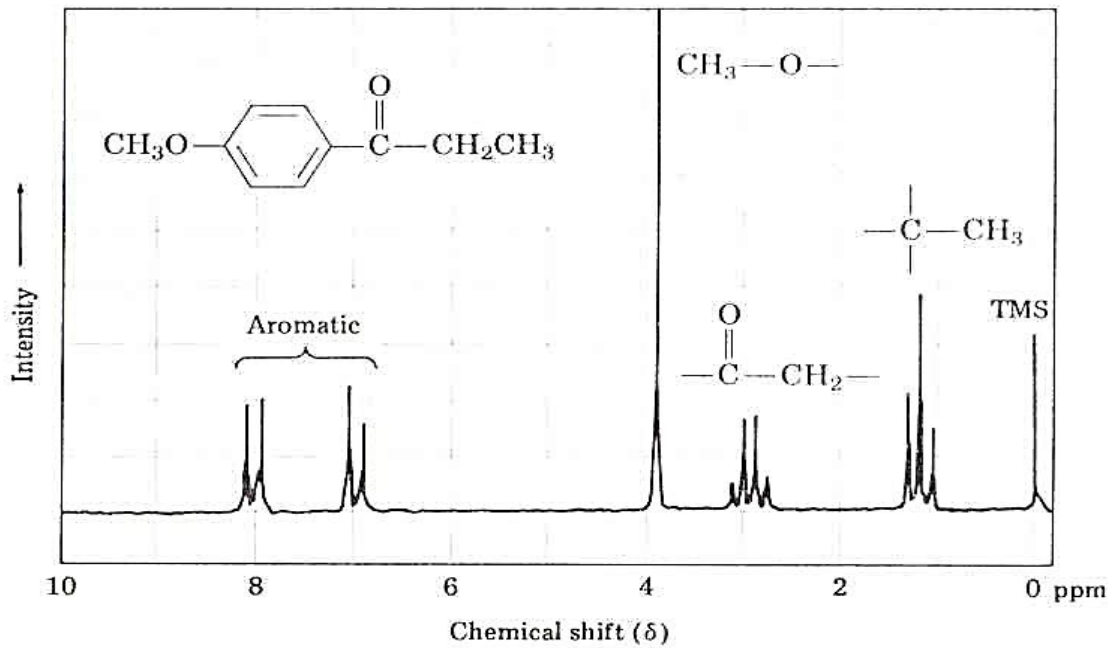
Şekil 29 2,2-dimetilpropanoat ' in ^1H nmr spektrumu.



Şekil 30 Kloroetan ' in ^1H nmr spektrumu.

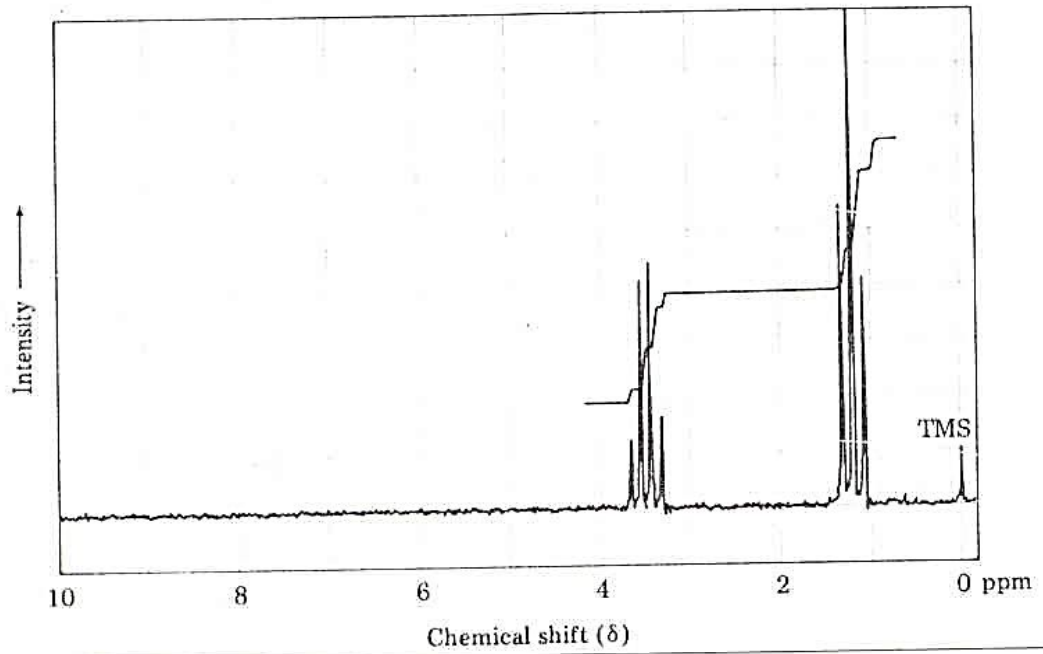


(a)

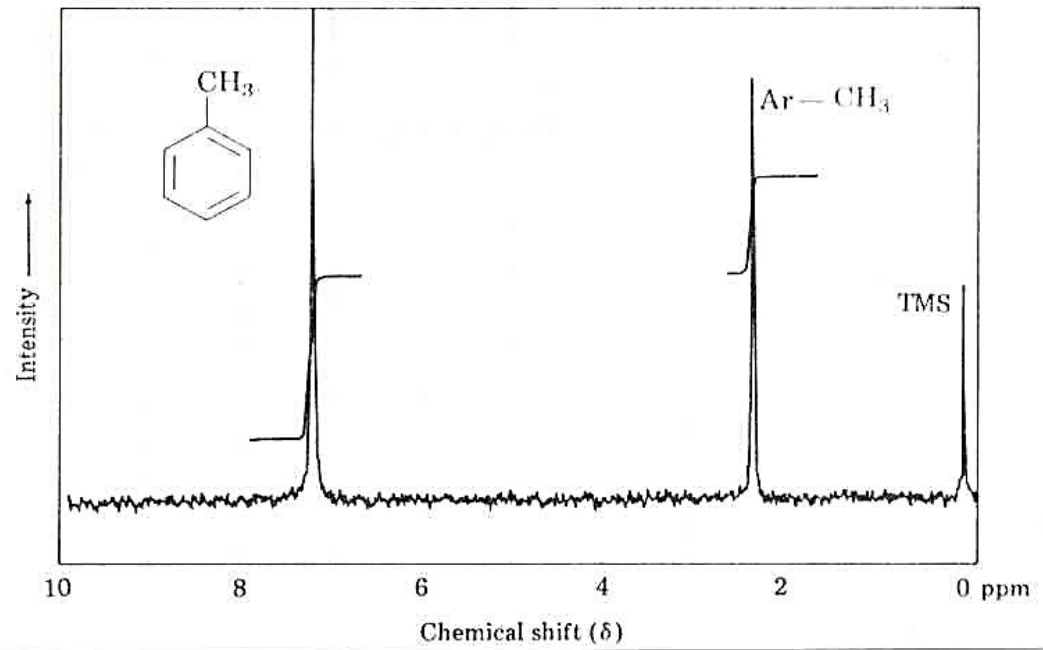


(b)

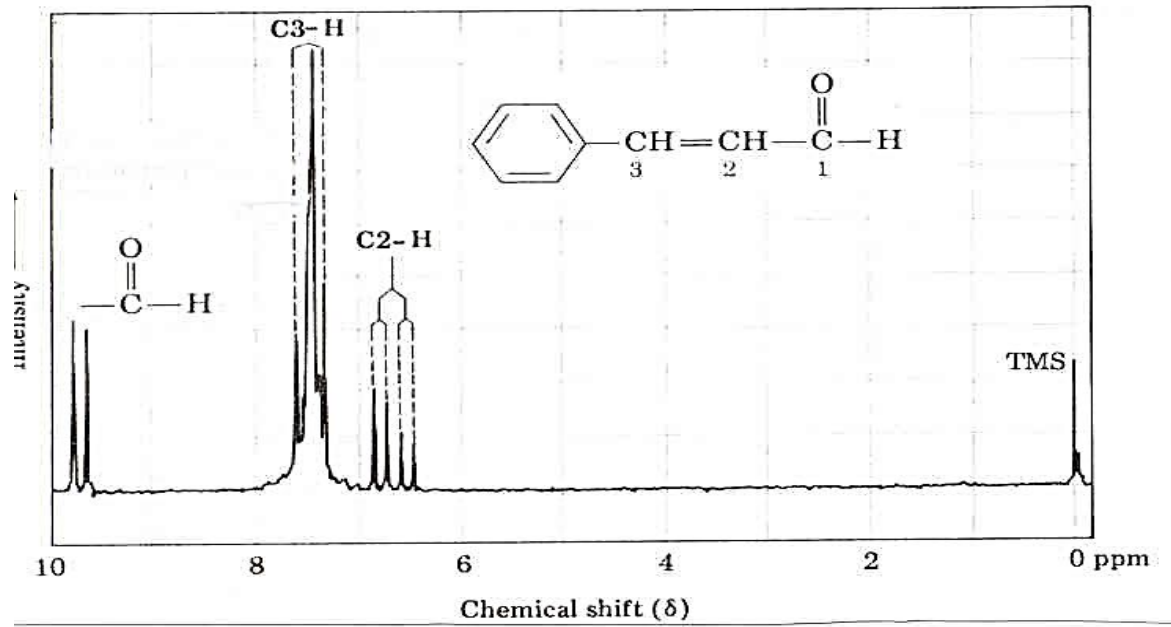
Şekil 3| a) 2-bromopropan, b) p-metoksipropiofenon ' un ^1H nmr spektrumla



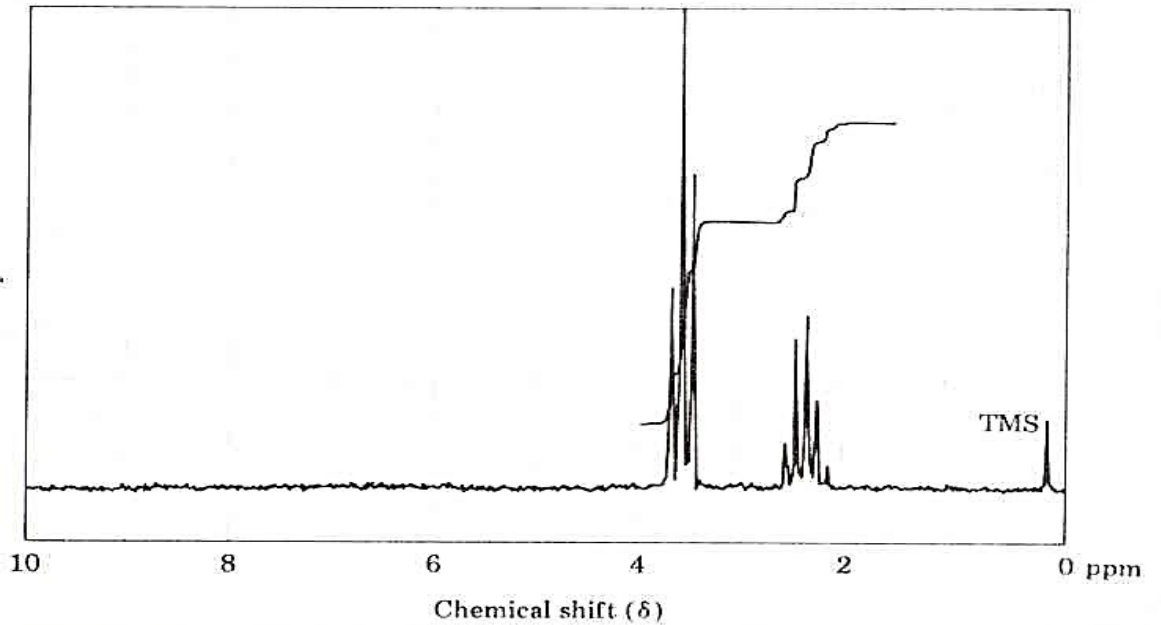
Şekil 32 $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ 'nun ^1H nmr spektrumu.



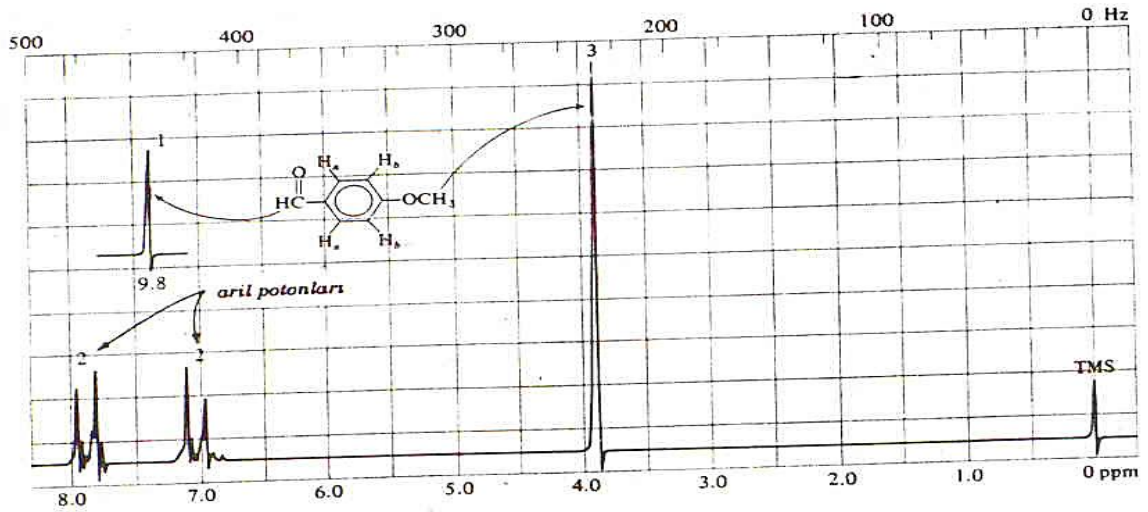
Şekil 33 Toluene 'in ^1H nmr spektrumu.



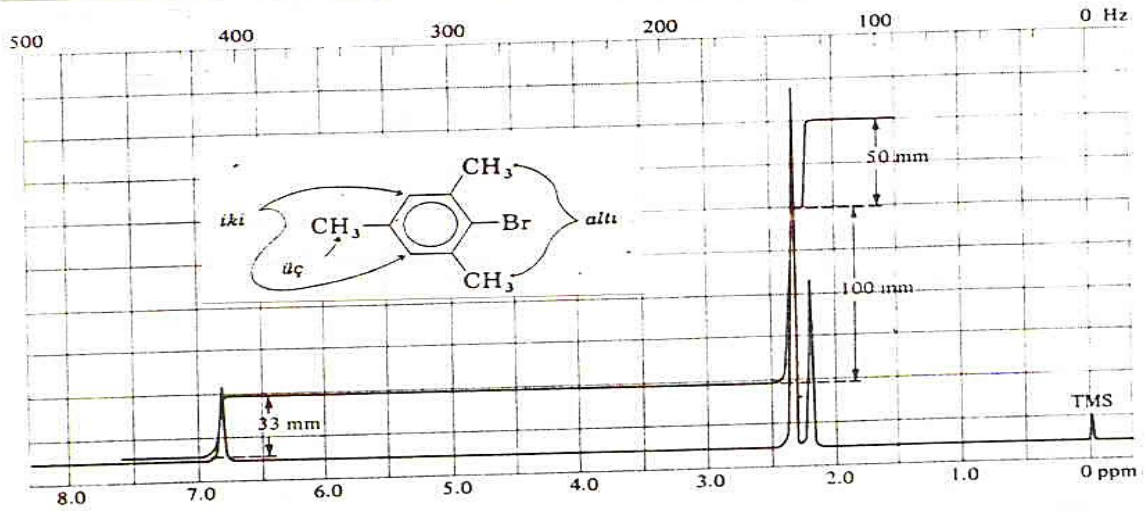
Şekil 34 Trans-sinamaldehyit ' in ¹H nmr spektrumu.



Şekil 35 C₂H₄Br₂ ' nin ¹H nmr spektrumu.



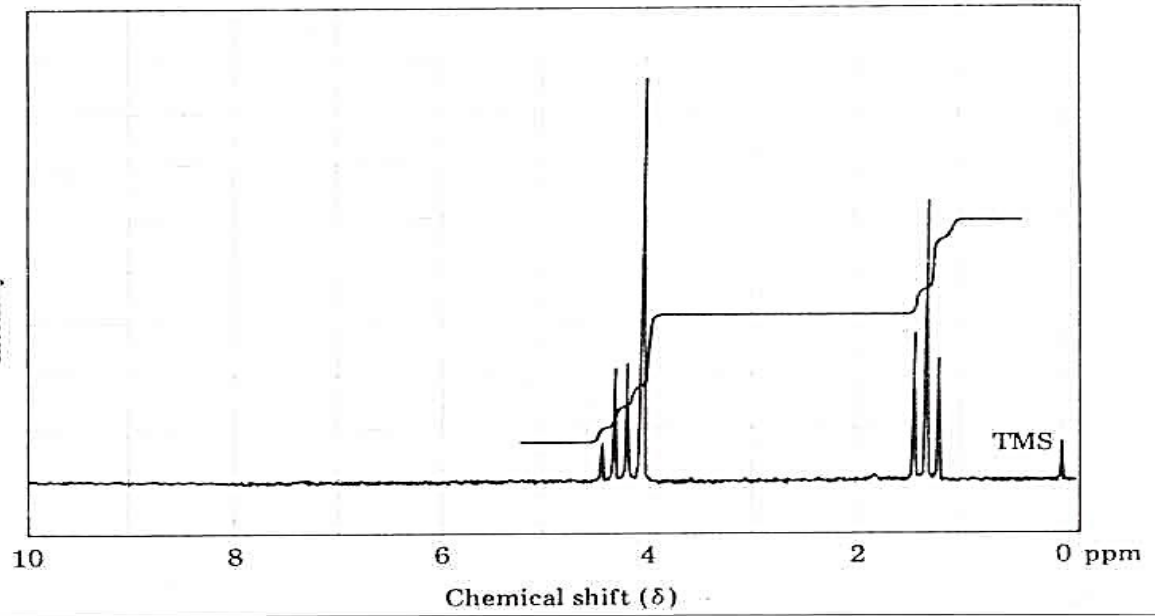
Şekil 36 p-Metoksibenzaldehidin ^1H nmr spektrumu. Aldehit protonunun offset sinyaline dikkat ediniz.



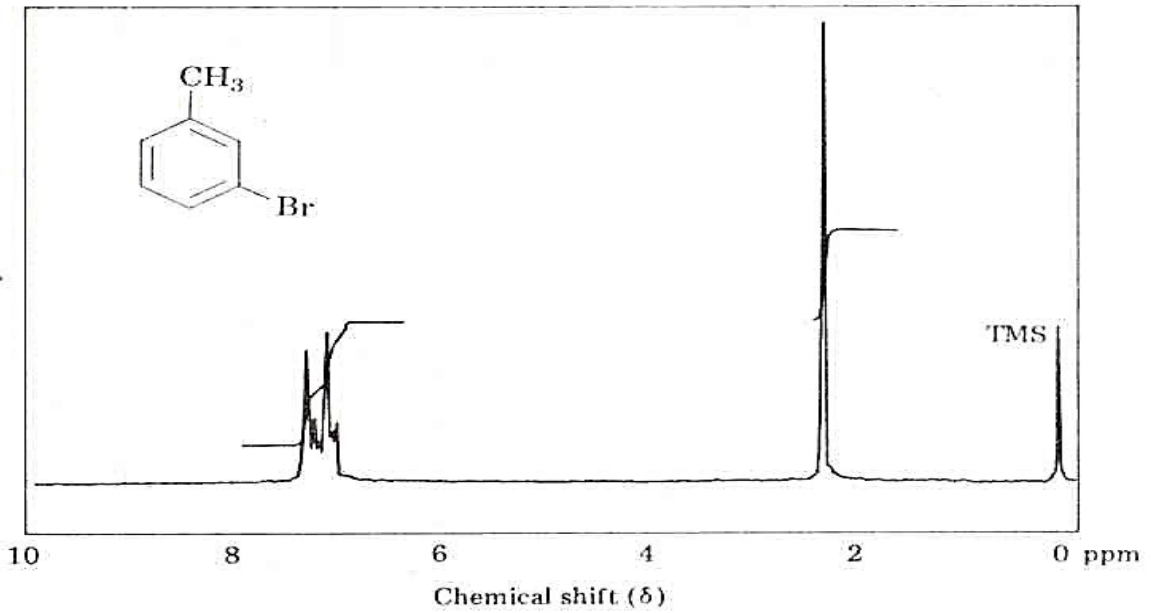
Şekil 37 1-Brom - 2, 4, 6 - trimetilbenzen' in integrasyon eğrisini gösteren ^1H nmr spektrumu

Alıştırımlar

- 5 Aşağıdaki bileşiklerden hangisi nmr spektrumunda en az bir singlet gösterir?
- (a) CH_3CH_3 (b) $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)_2$ (c) $(\text{CH}_3)_3\text{CCl}$
 (d) $\text{Cl}_3\text{CCHCl}_2$ (e) $\text{ClSi}(\text{CH}_3)_3$
- 6 (a) Sikloheksan ve (b) benzen'in nmr spektrumlarında kaç pik gözlenmesini beklersiniz?

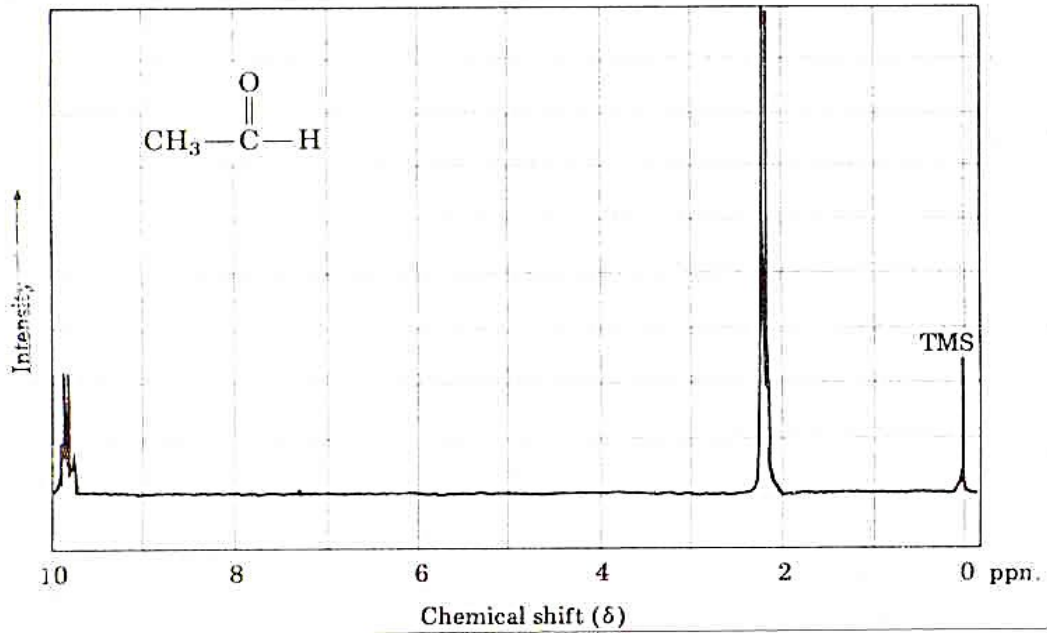
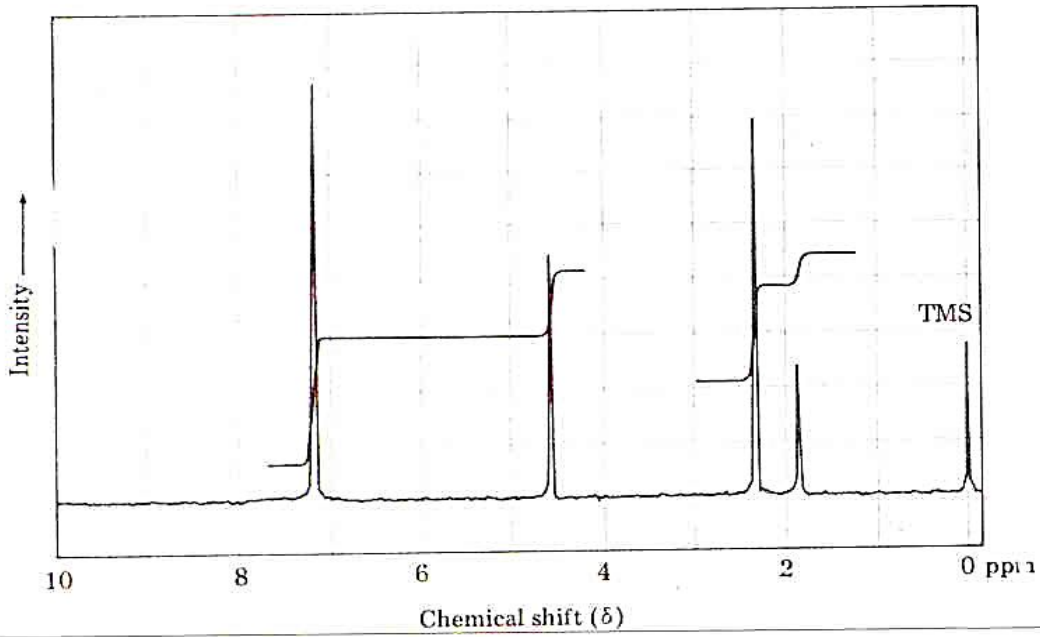


Şekil 37 $C_4H_7O_2Cl$ 'nin ' in 1H nmr spektrumu, (IR, 1740 cm^{-1}).

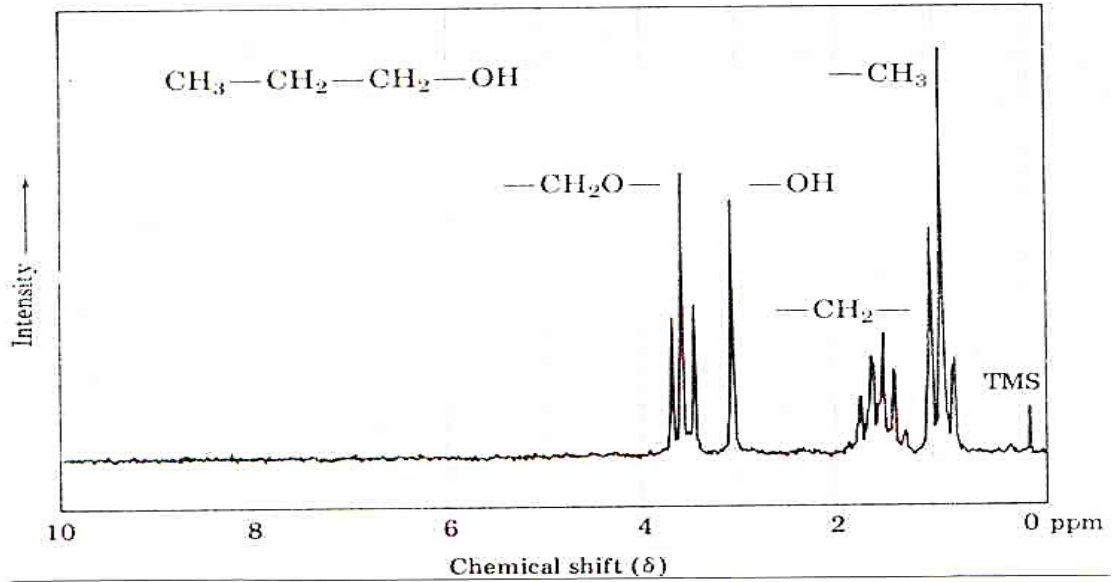


Şekil 38 m-bromtoluen ' in 1H nmr spektrumu.

Alıştırma 7 Aşağıdaki $C_8H_{10}O$ maddesinin 1H nmr spektrumunu yorumlayınız?

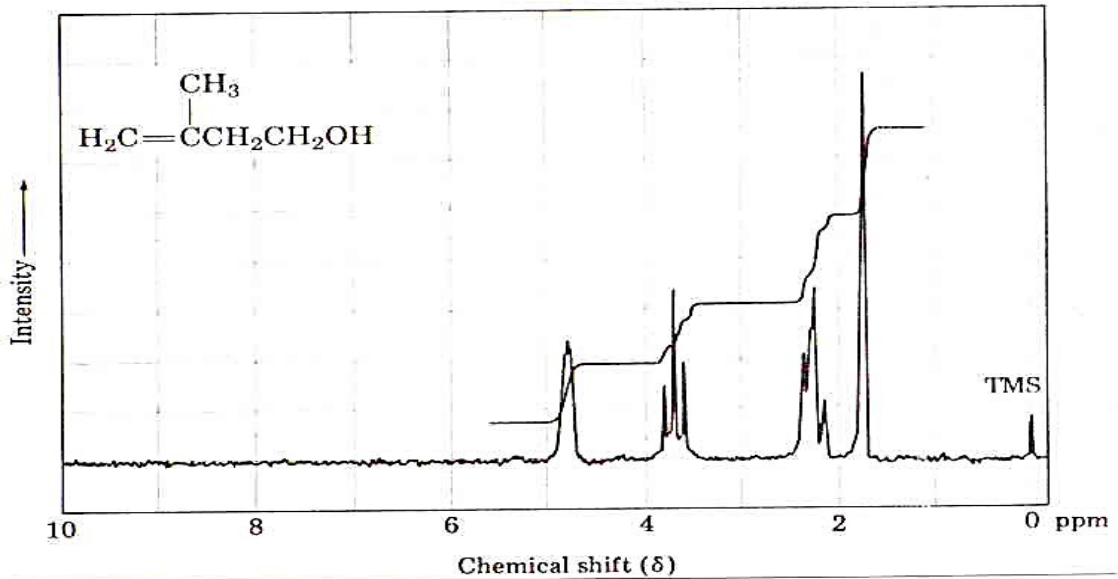


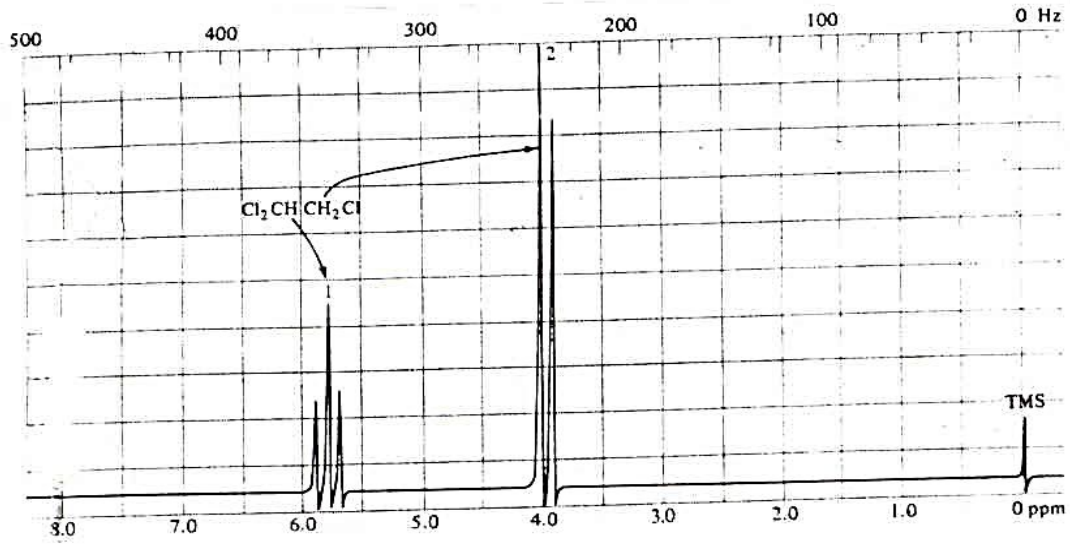
Şekil 40 Acetaldehit' in 1H nmr spektrumu.



Şekil 4/ 1-propanol' un ¹H nmr spektrumu.

Alıştırma 8 Aşağıdaki ¹H nmr spektrumunu yorumlayınız?





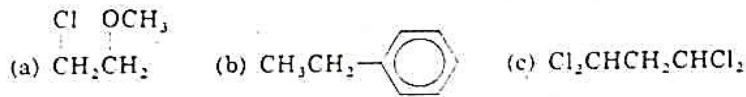
Şekil 1,1,2-Trikloreten'in ^1H nmr spektrumu

Alıştırma

9. 1,1,2- Trikloretan'da Cl_2CH grubundaki protonun CH_2Cl grubundaki protonlardan daha az perdelendiği gerçeği için bir neden gösteriniz.

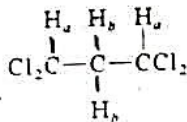
Örnek

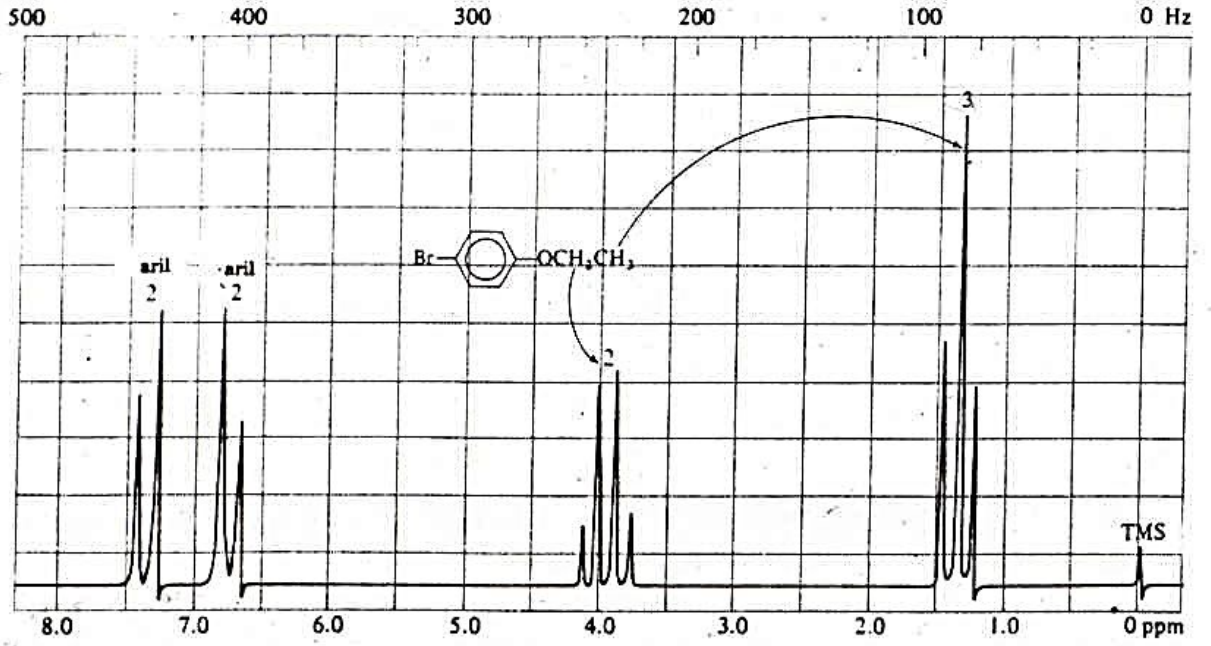
1. Aşağıdaki bileşiklerden hangisi bir triplet (diğer sinyallerin yanısıra) gösterir? Her bileşik kaç triplet gösterecektir?



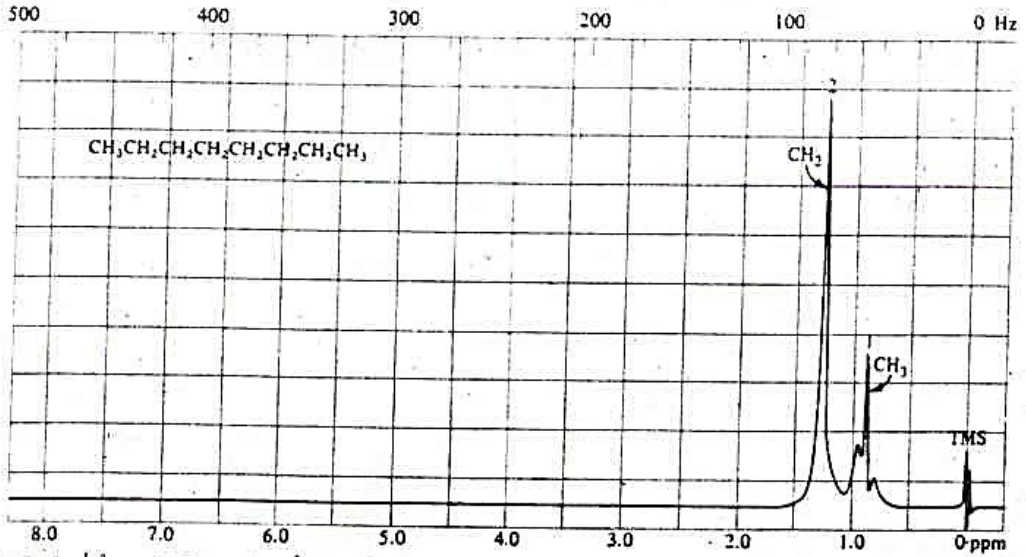
Çözüm:

(a) her CH_2 için bir tane olmak üzere iki triplet; (b) bir CH_3 için bir triplet; (c) iki triplet H_a iki H_b ile ve H_b iki H_a ile yarılr.

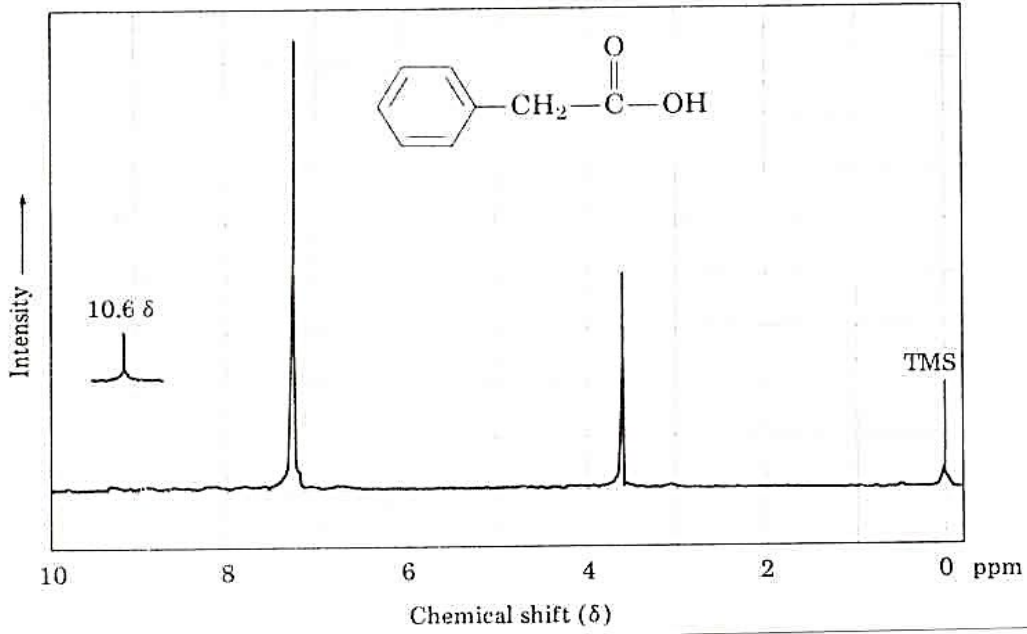




Şekil 43 Tipik etil grubunu gösteren ^1H nmr spektrumu

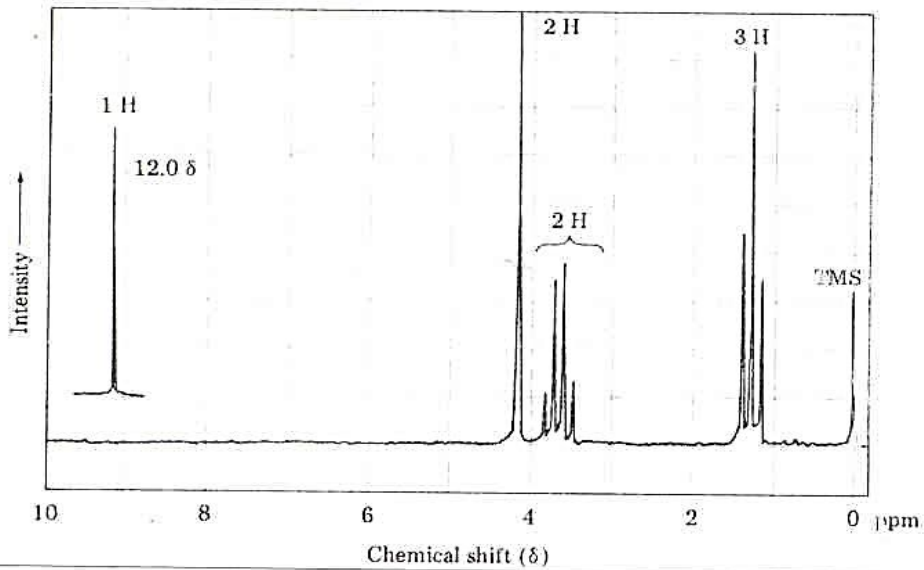


Şekil 44 n-Oktan'ın ^1H nmr spektrumu

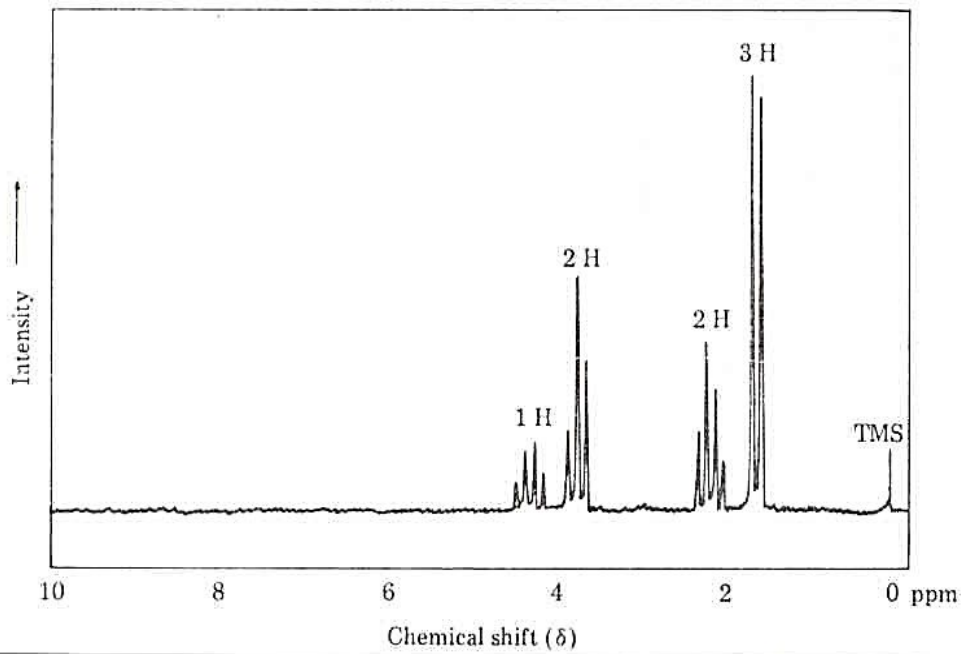
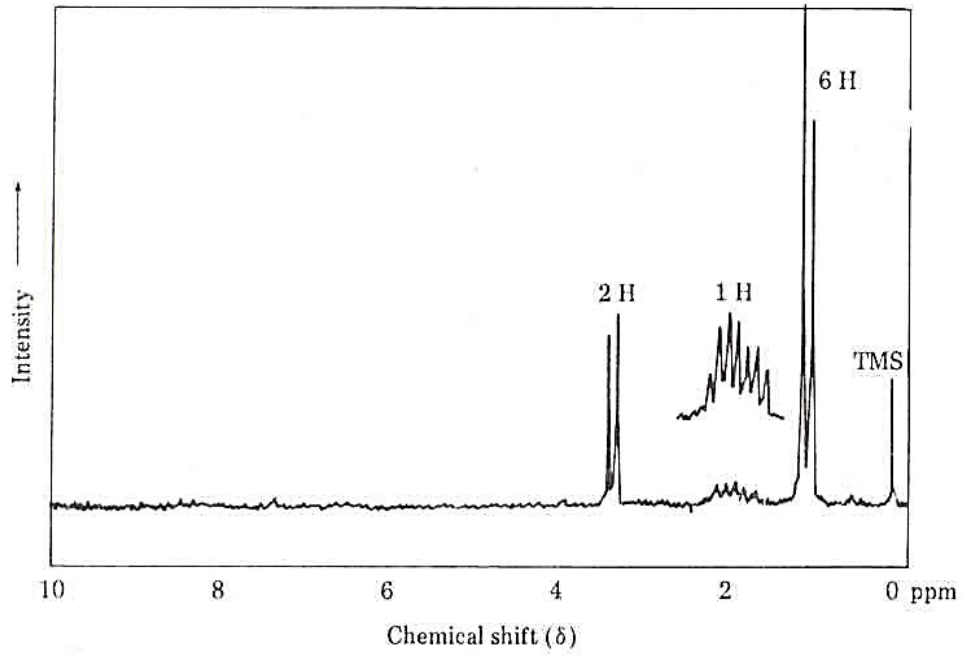


Şekil 45 Fenilasetikasıit' in ^1H nmr spektrumu.

Alıştırma 10 Aşağıdaki $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_3$ maddesinin ^1H nmr spektrumunu yorumlayınız?

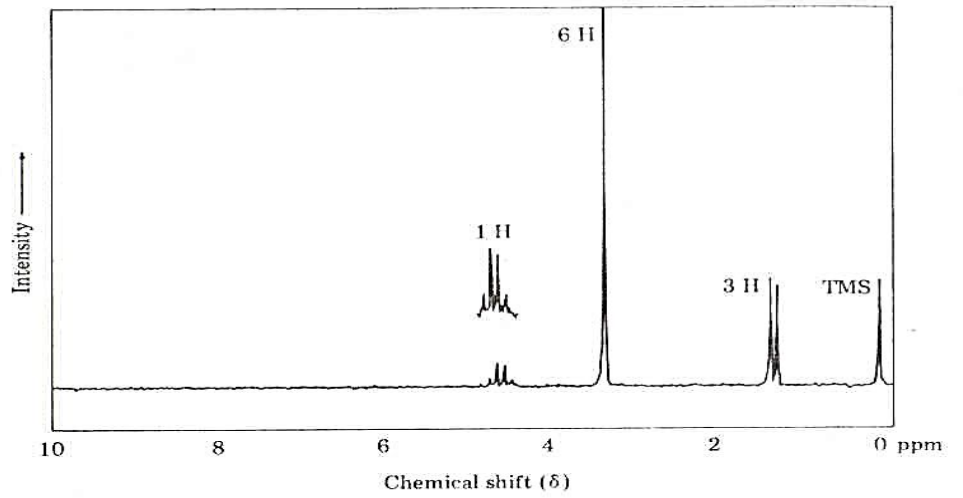


Alıştırma 11 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarından hangisi a) $\text{C}_4\text{H}_9\text{Br}$, b) $\text{C}_4\text{H}_8\text{Cl}_2$ ye aittir?

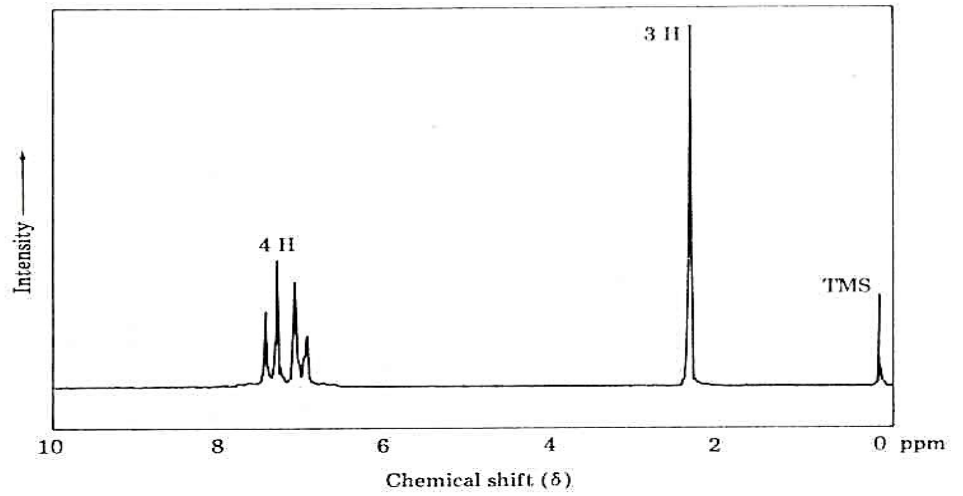


Alıştırma 12 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-c yorumlayınız?

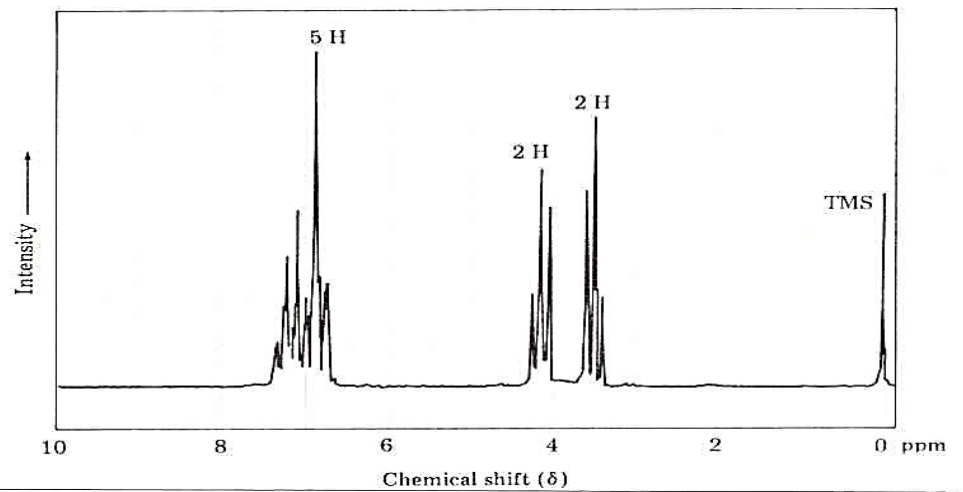
(a) $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}_2$



(b) $\text{C}_7\text{H}_7\text{Br}$

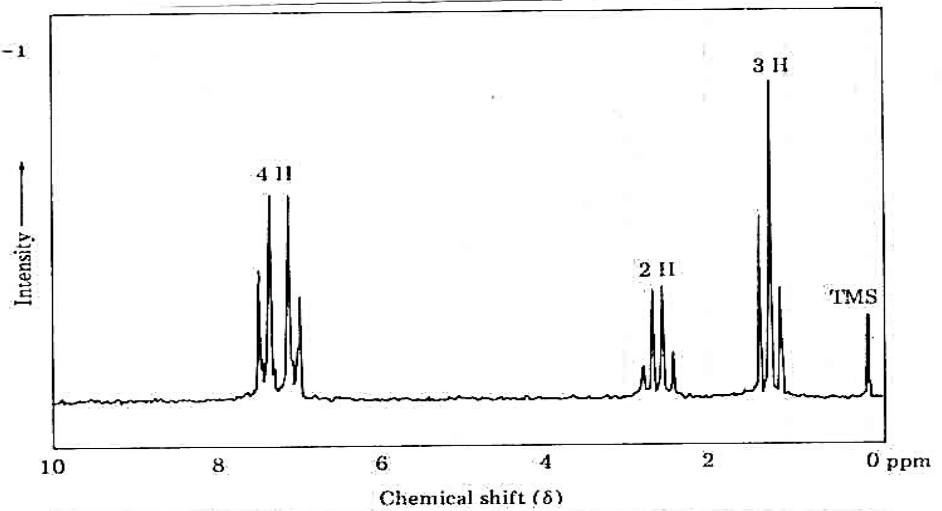


(c) $\text{C}_8\text{H}_9\text{Br}$

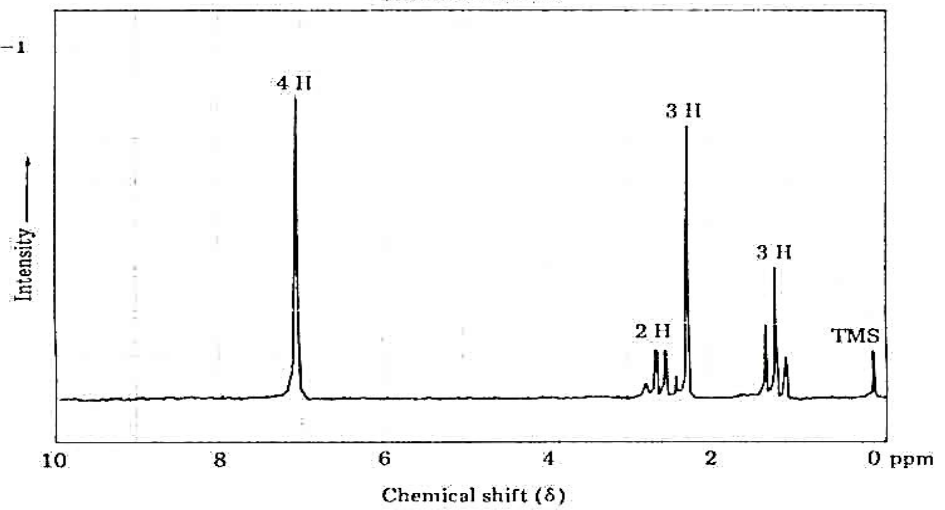


Alıştırma 13 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-c yorumlayınız?

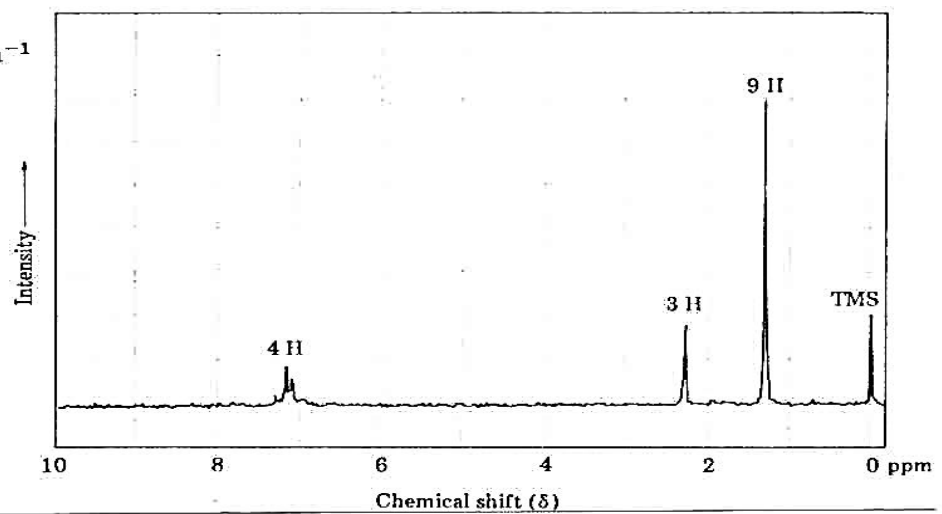
(a) $\text{C}_8\text{H}_9\text{Br}$;
IR: 820 cm^{-1}



(b) C_9H_{12} ;
IR: 750 cm^{-1}

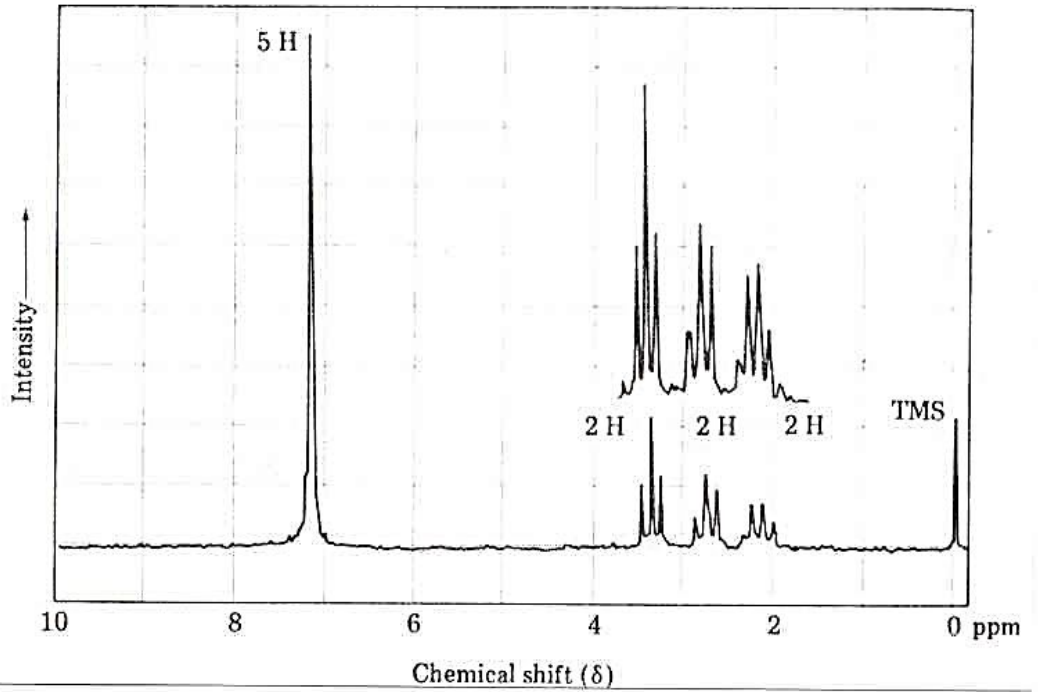


(c) $\text{C}_{11}\text{H}_{16}$;
IR: 820 cm^{-1}

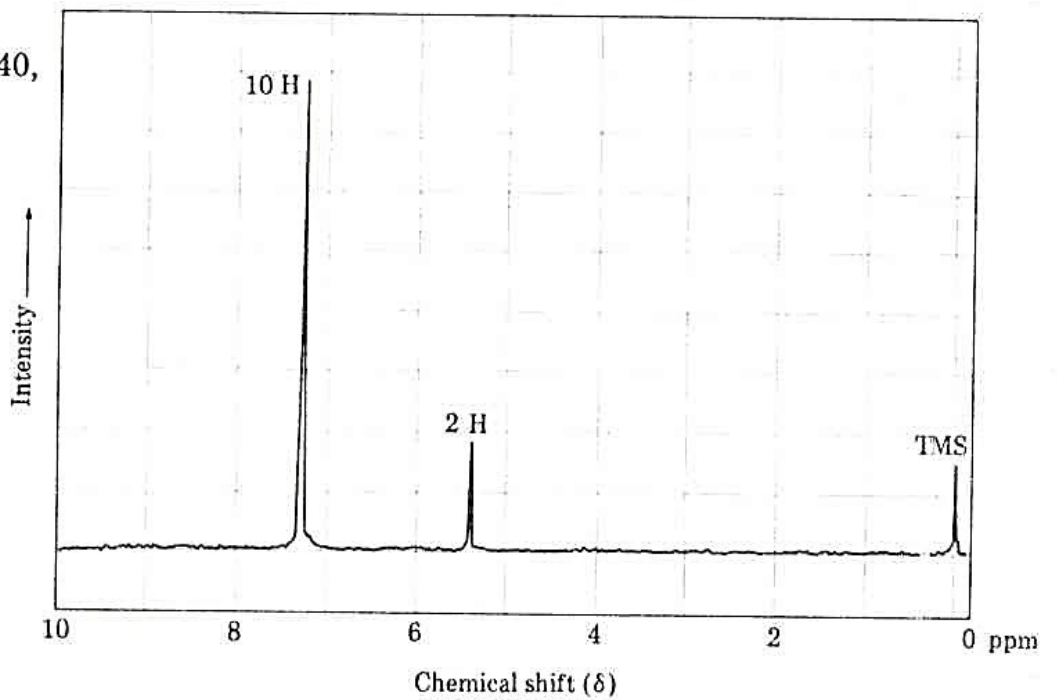


Alıştırma 14 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-b yorumlayınız?

(a) $\text{C}_9\text{H}_{11}\text{Br}$;
IR: 700,
760 cm^{-1}

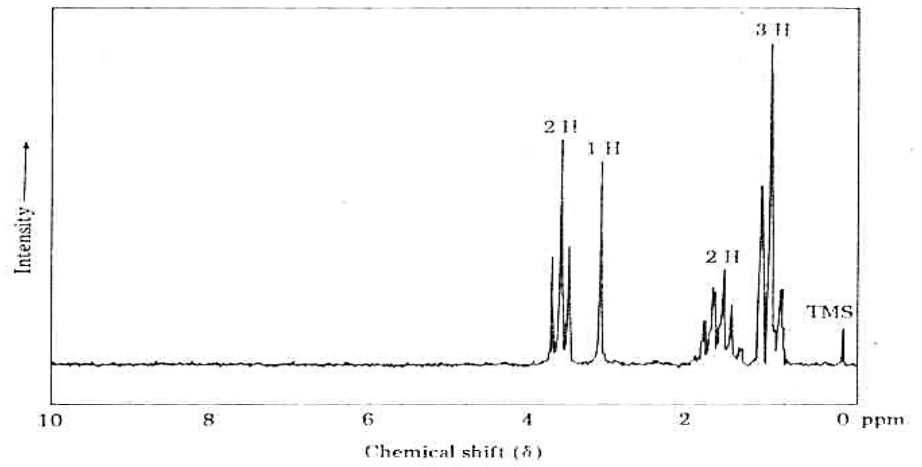


(b) $\text{C}_{14}\text{H}_{12}$;
IR: 700, 740,
890 cm^{-1}

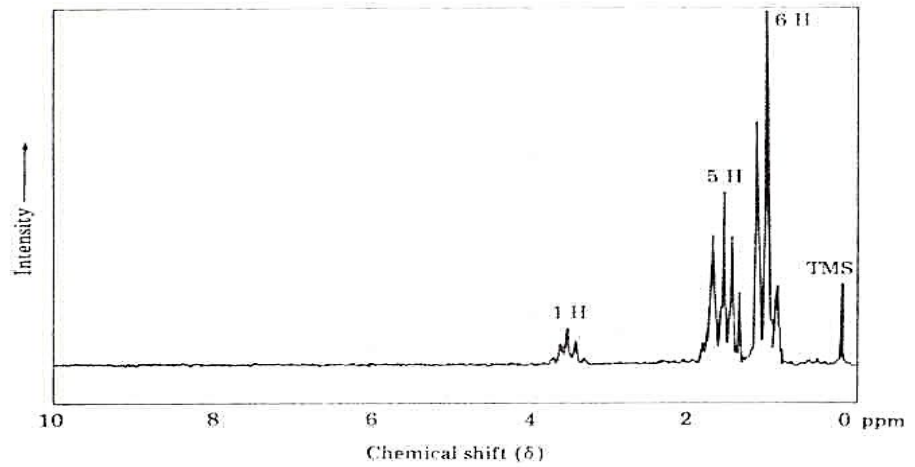


Alıştırma 15 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-c yorumlayınız?

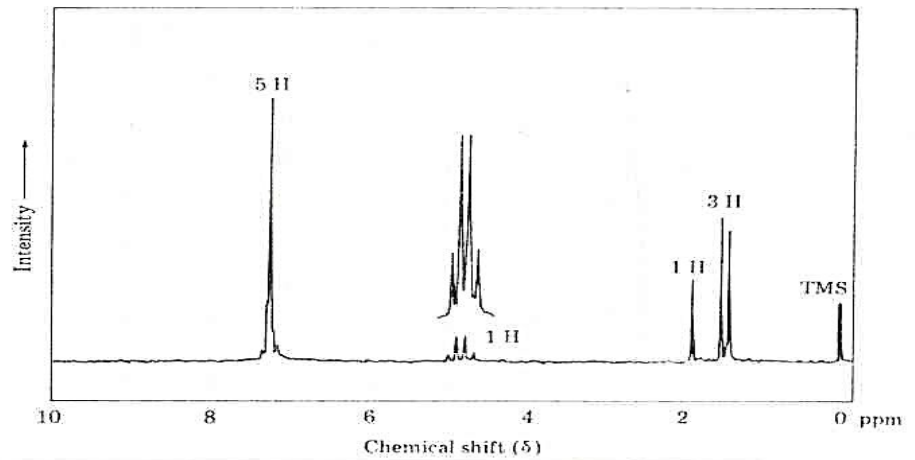
(a) $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$



(b) $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$

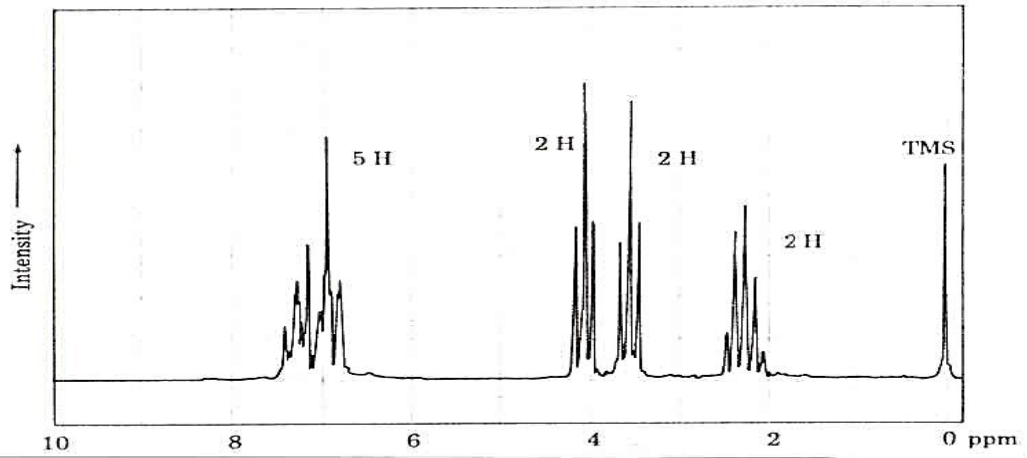


(c) $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}$

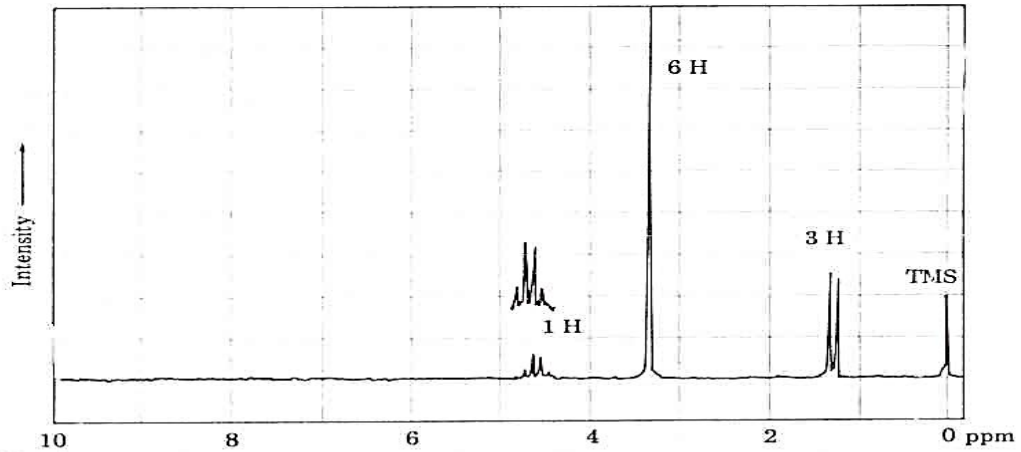


Alıştırma 16 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-c yorumlayınız?

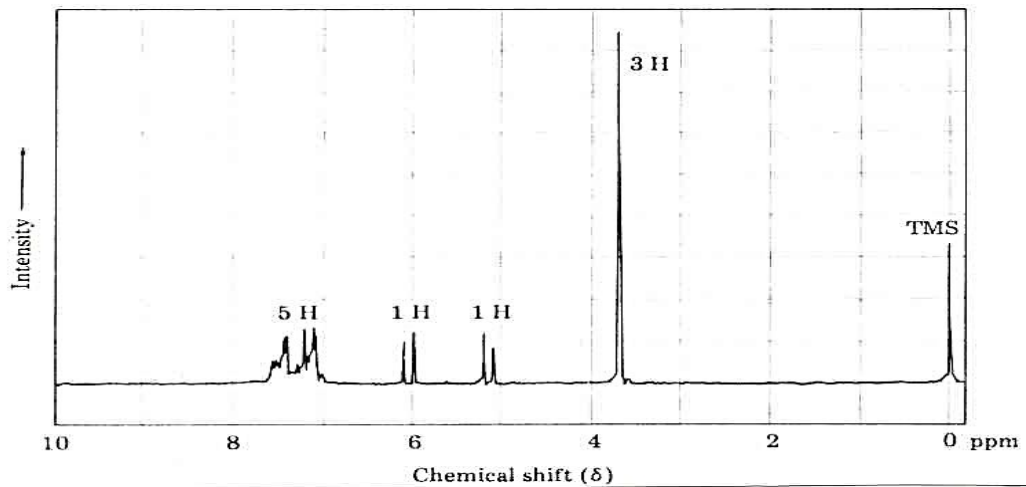
(a) $\text{C}_9\text{H}_{11}\text{BrO}$



(b) $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}_2$

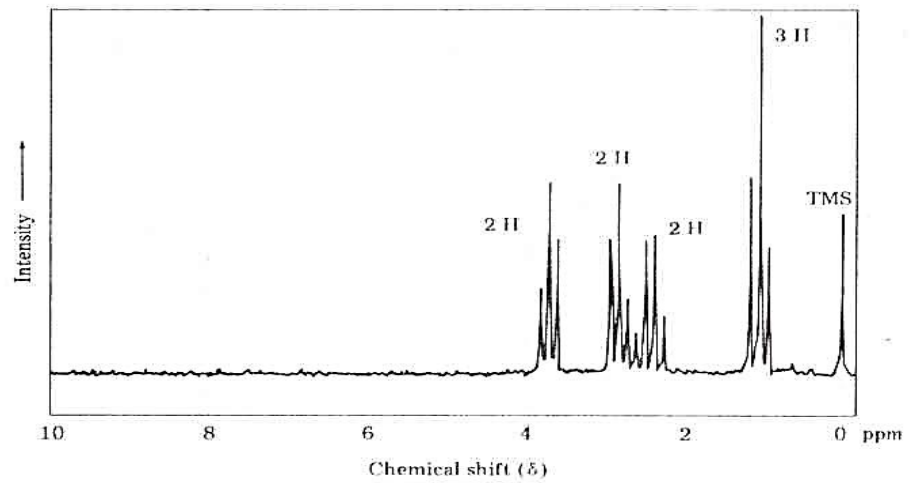


(c) $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}$

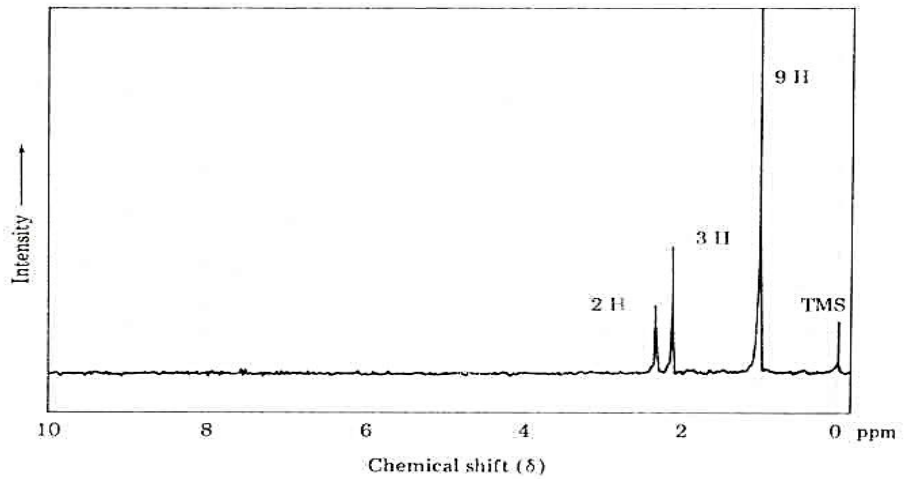


Alıştırma 17 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-c yorumlayınız?

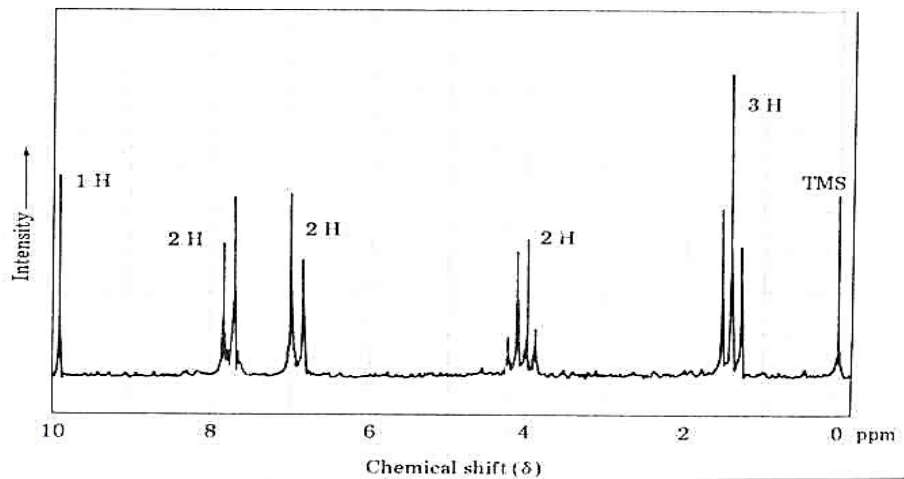
(a) $\text{C}_5\text{H}_9\text{ClO}$;
IR: 1710 cm^{-1}



(b) $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{O}$;
IR: 1710 cm^{-1}

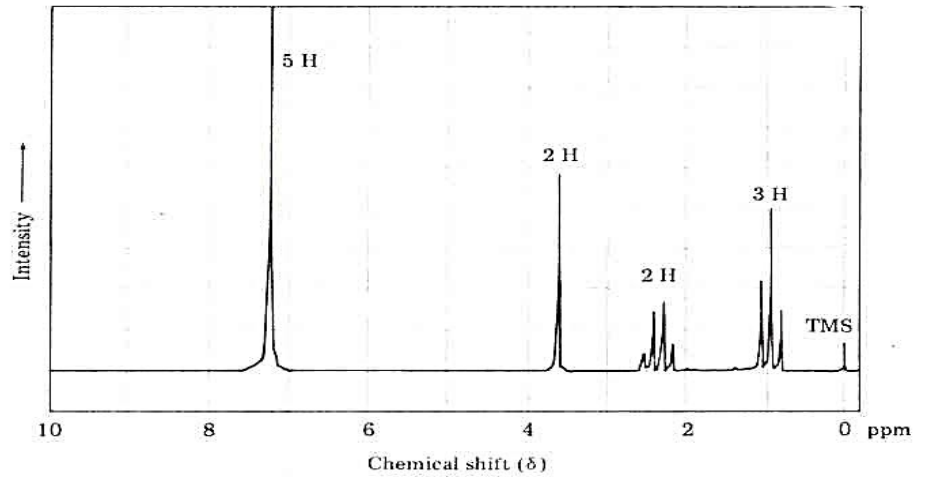


(c) $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_2$;
IR: 1695 cm^{-1}

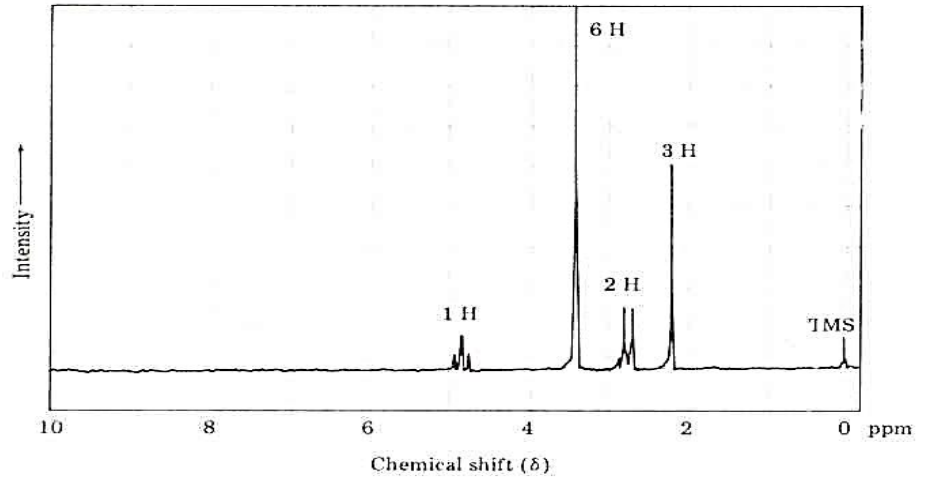


Alıştırma 18 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-c yorumlayınız?

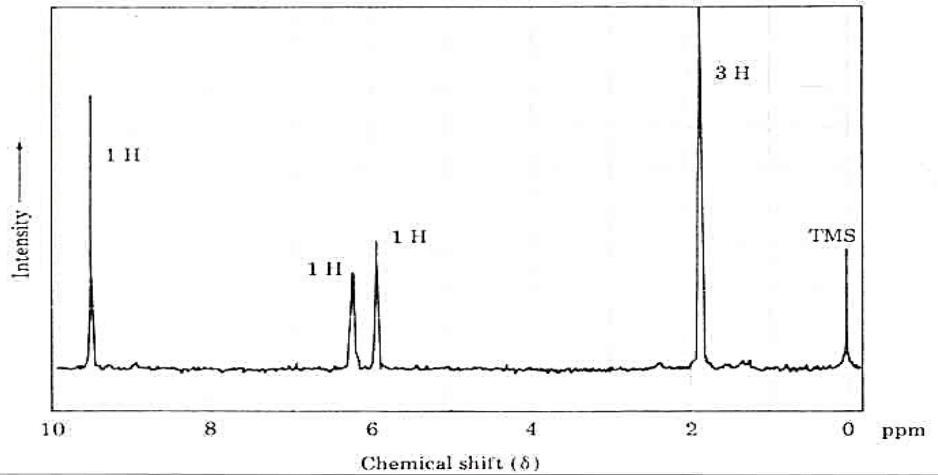
(a) $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}$;
IR: 1710 cm^{-1}



(b) $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_3$;
IR: 1715 cm^{-1}

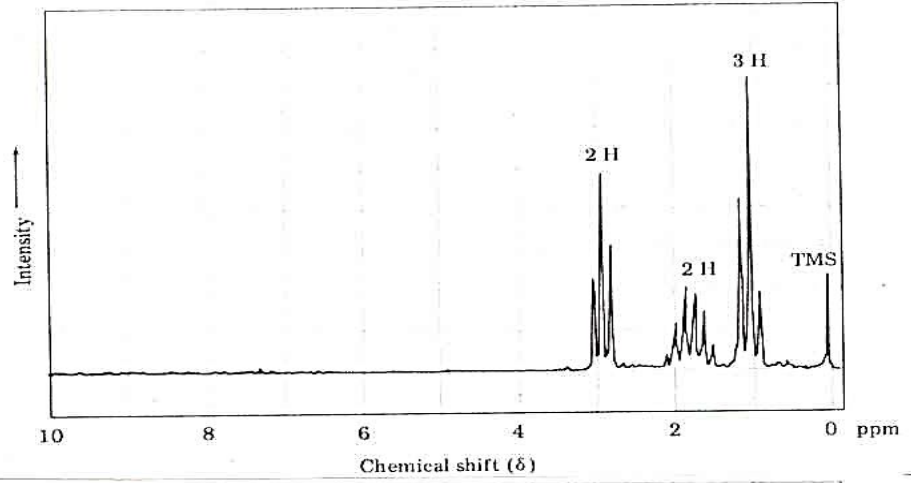


(c) $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}$;
IR: 1690 cm^{-1}

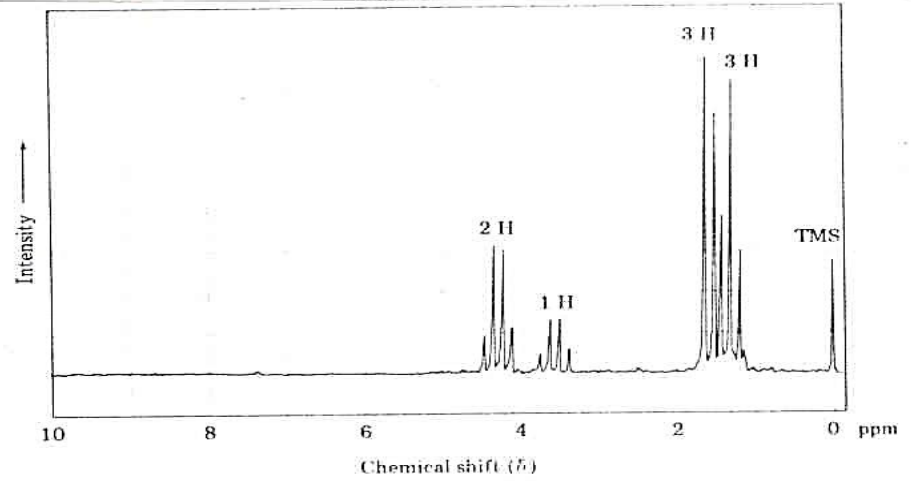


Alıştırma 18 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-c yorumlayınız?

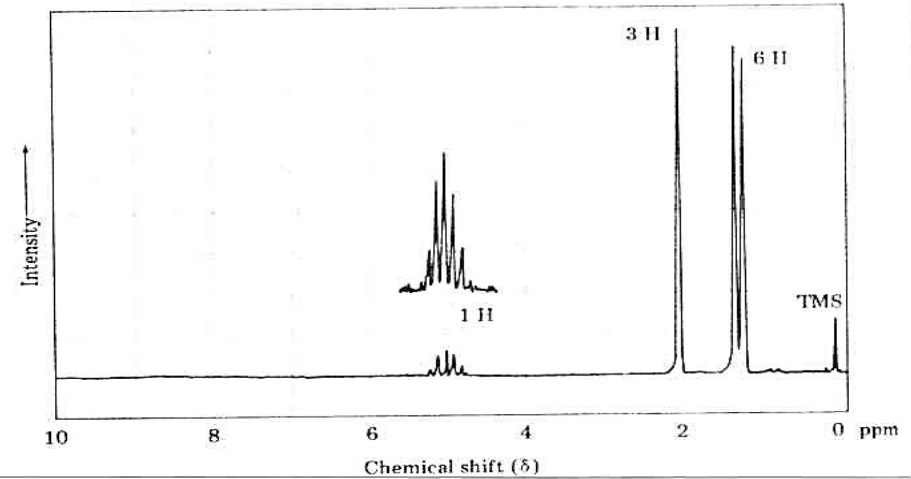
(a) $\text{C}_4\text{H}_7\text{ClO}$;
IR: 1810 cm^{-1}



(b) $\text{C}_6\text{H}_9\text{NO}_2$;
IR: 2250 ,
 1735 cm^{-1}

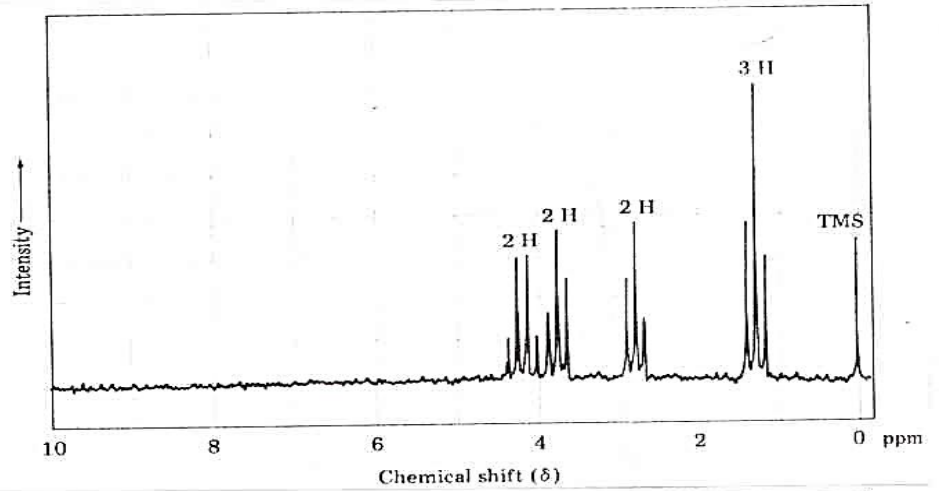


(c) $\text{C}_5\text{H}_{10}\text{O}_2$;
IR: 1735 cm^{-1}

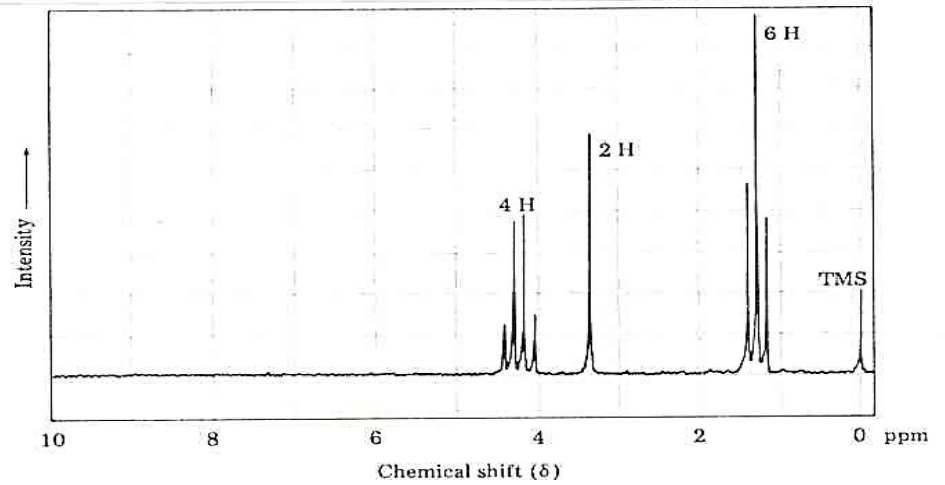


Alıştırma 20 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-c yorumlayınız?

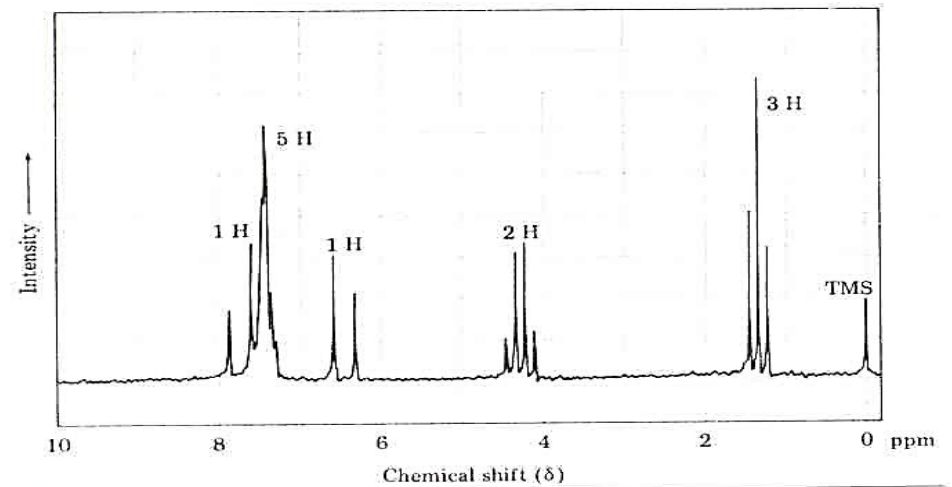
(a) $\text{C}_5\text{H}_9\text{ClO}_2$;
IR: 1735 cm^{-1}



(b) $\text{C}_7\text{H}_{12}\text{O}_4$;
IR: 1735 cm^{-1}

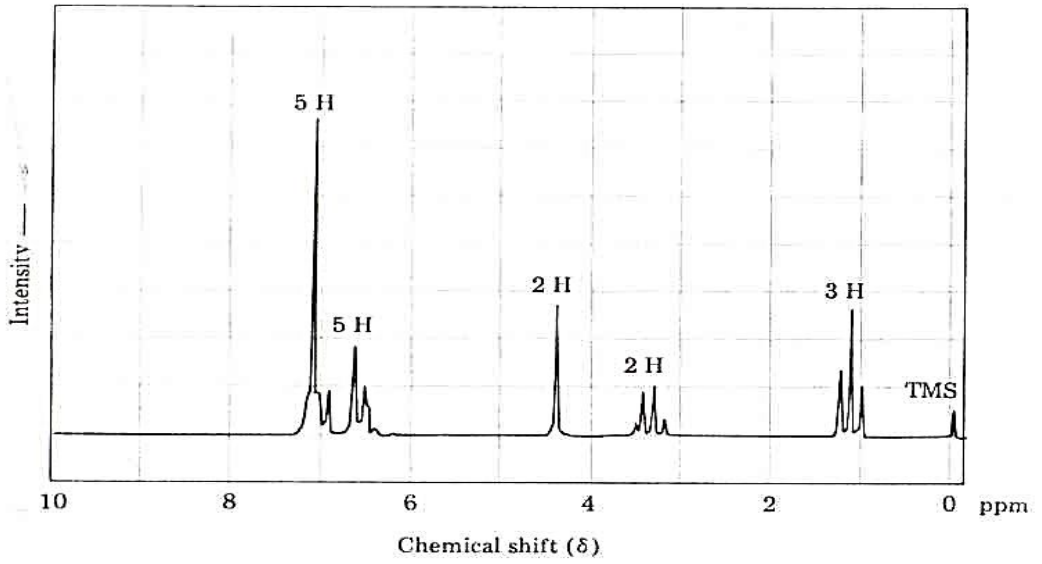


(c) $\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{O}_2$;
IR: 1710 cm^{-1}

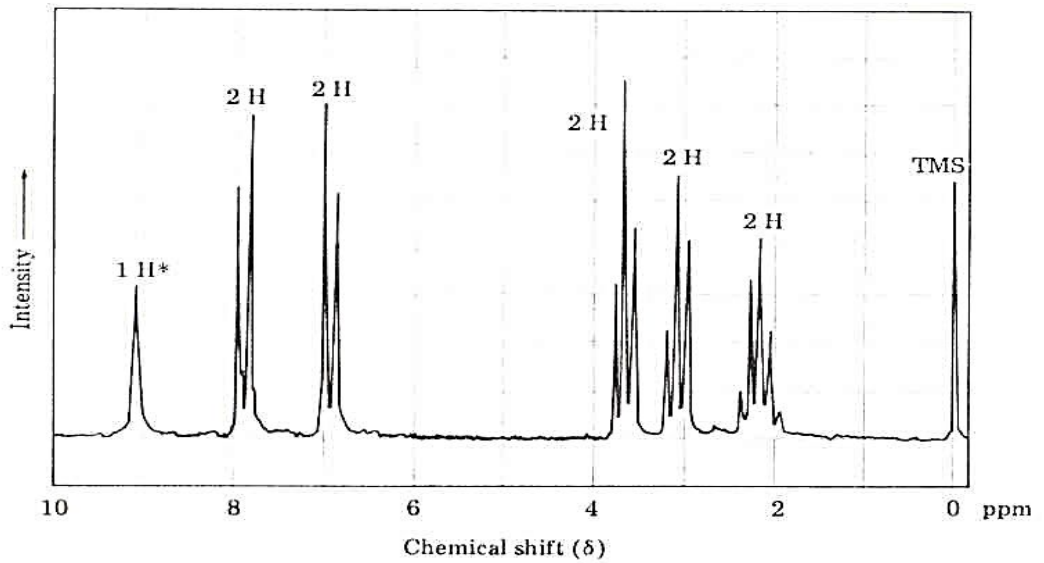


Alıştırma 21 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-b yorumlayınız?

(a) $\text{C}_{15}\text{H}_{17}\text{N}$

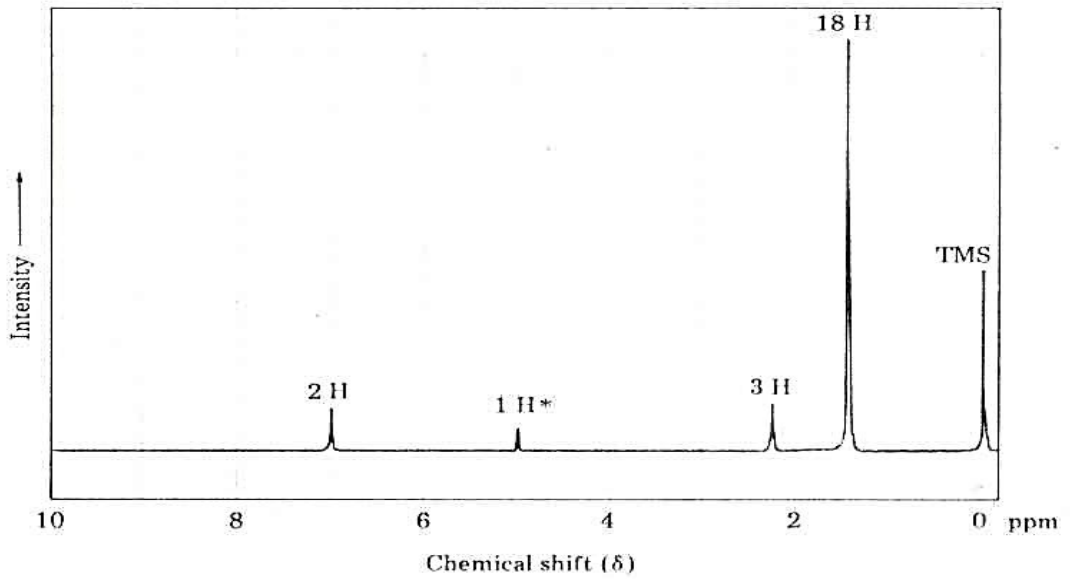


(b) $\text{C}_{10}\text{H}_{11}\text{ClO}_2$

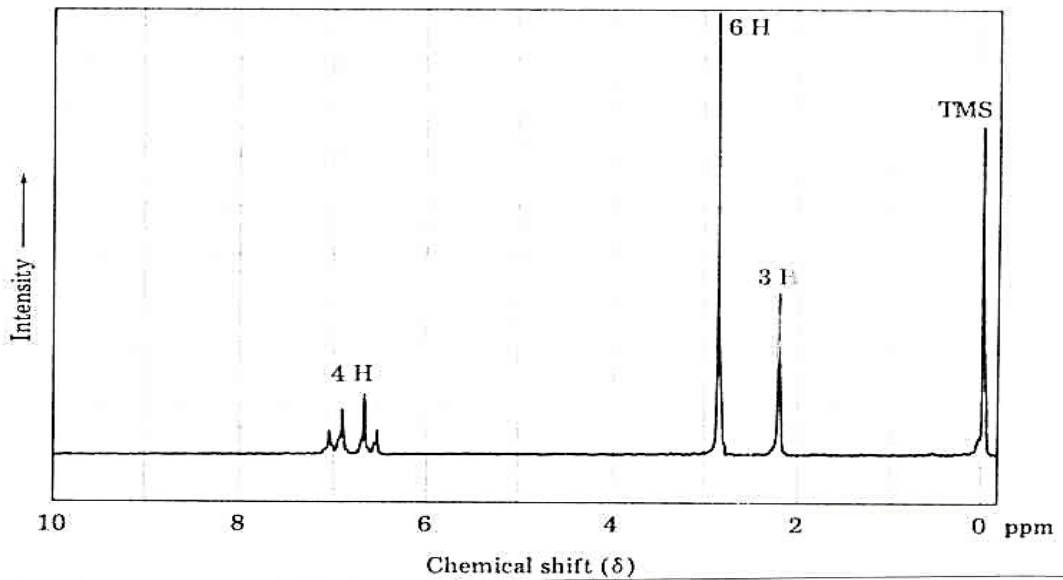


Alıştırma 22 Aşağıdaki ^1H nmr spektrumlarını a-b yorumlayınız?

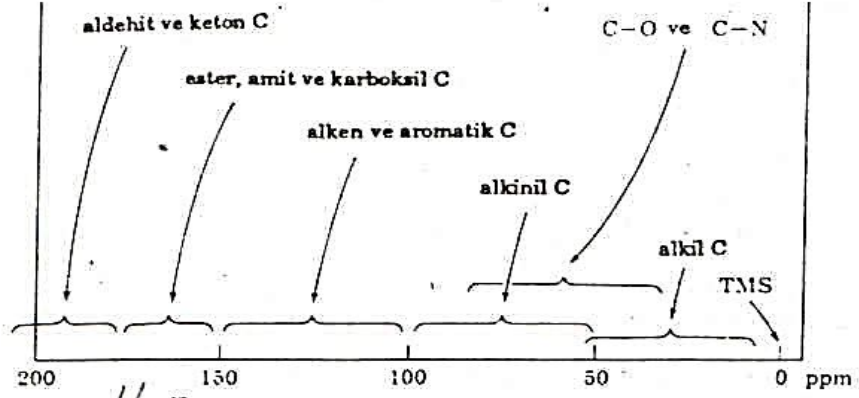
(a) $\text{C}_{15}\text{H}_{24}\text{O}$



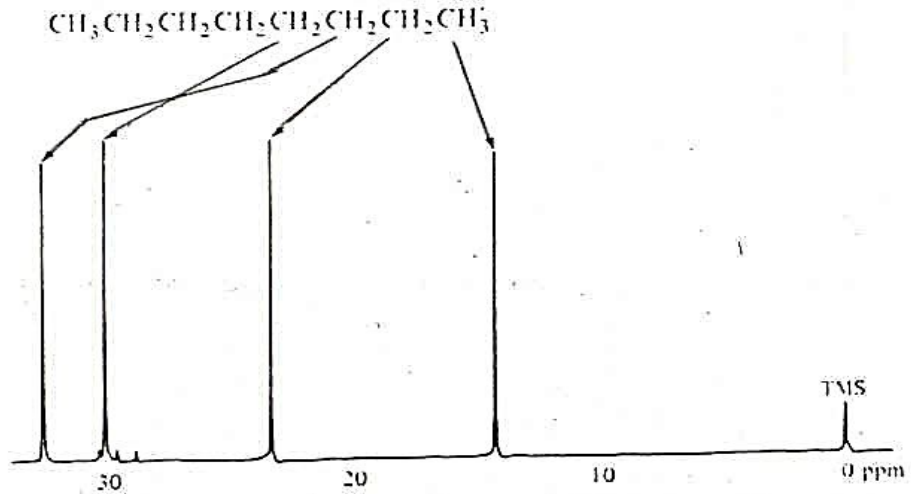
(b) $\text{C}_9\text{H}_{13}\text{N}$



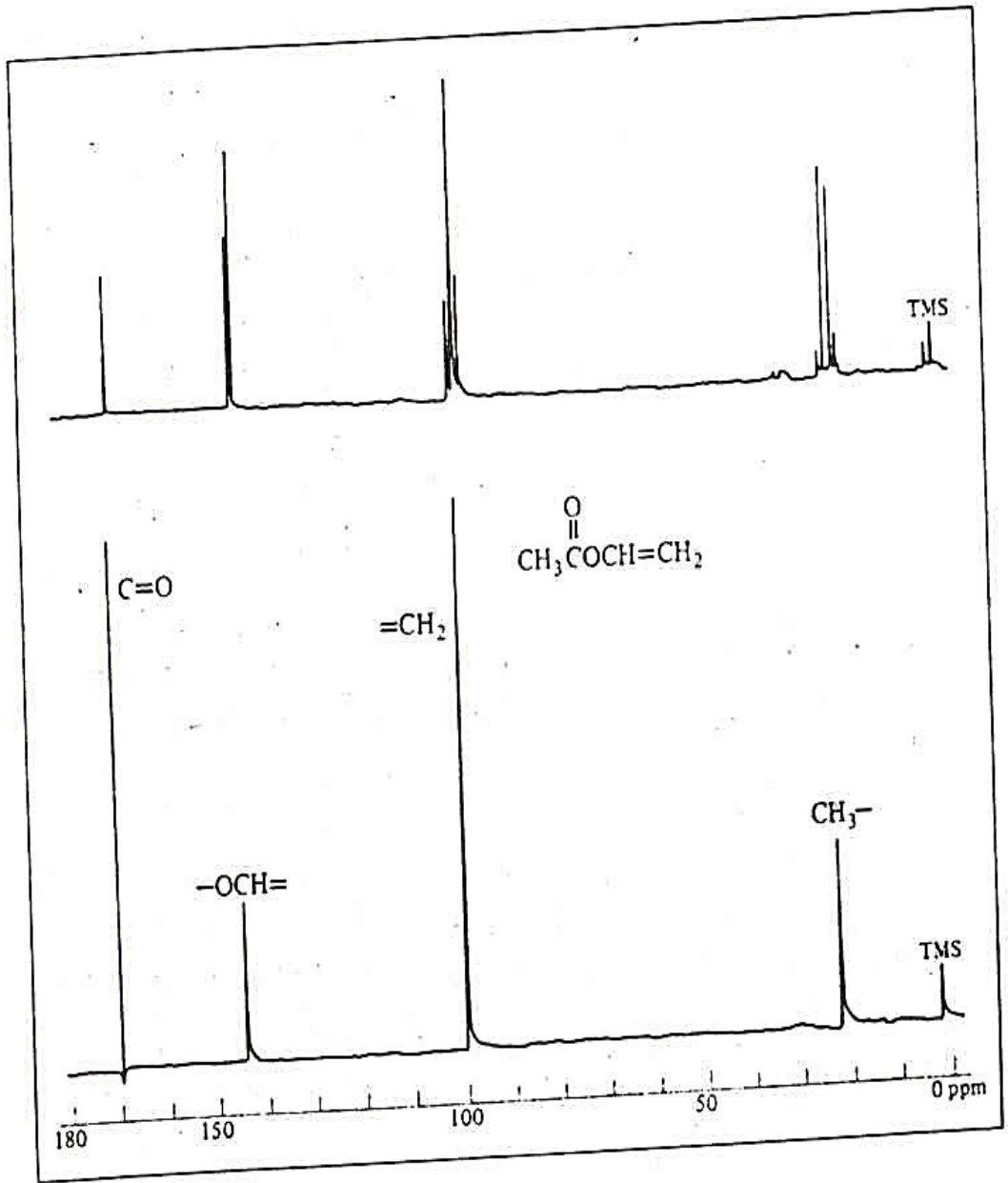
^{13}C NMR Spektrumu



Şekil 46, ^{13}C nmr soğurmasının bağıl konumları



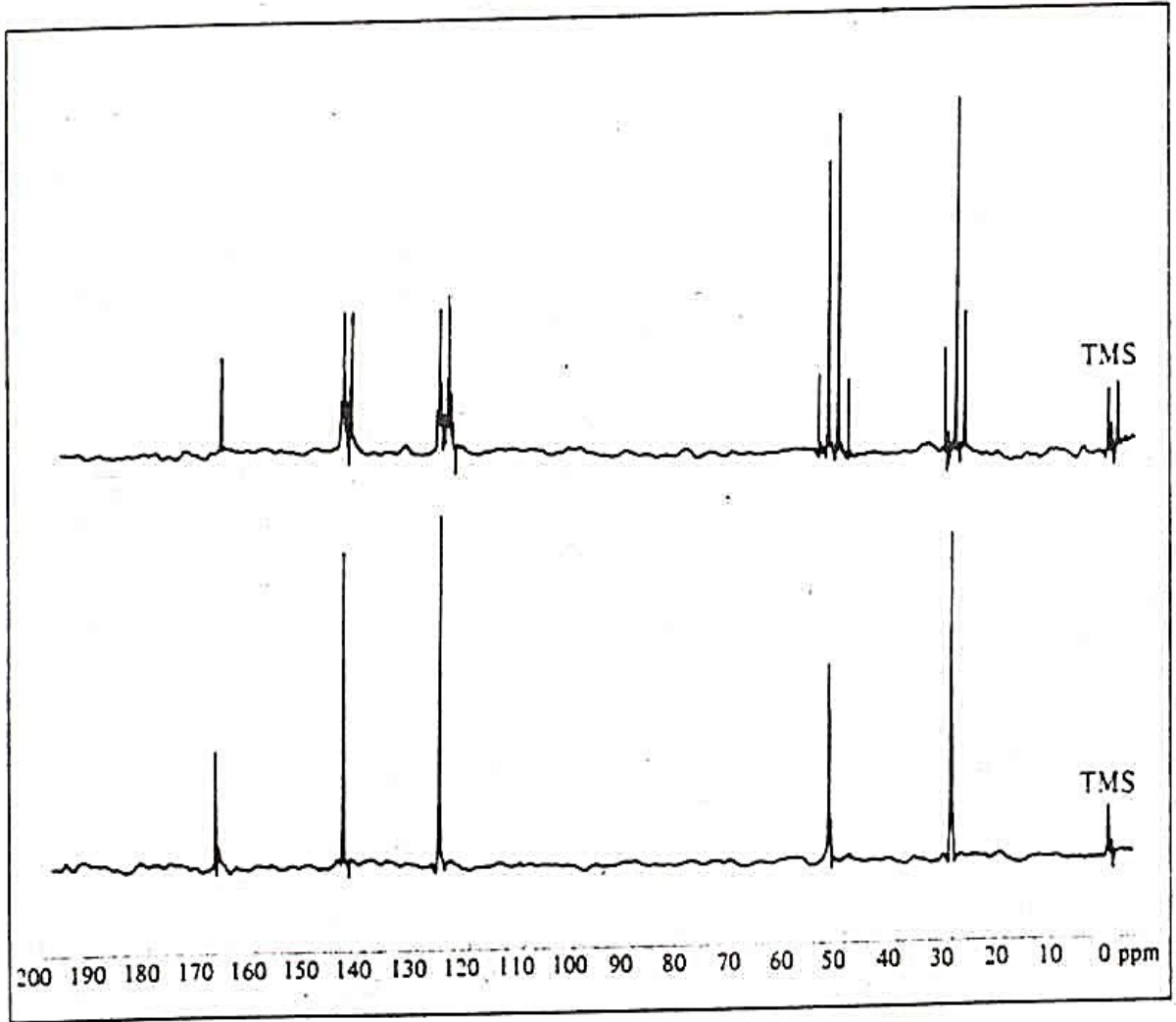
Şekil 47 n-Oktan'ın proton-eşleşmemiş ^{13}C nmr spektrumu



Şekil 48 Vinil asetat'ın rezonans dışı eşleşmemiş (üstteki) ve proton-eşleşmemiş (alttaki) ^{13}C nmr spektrumları

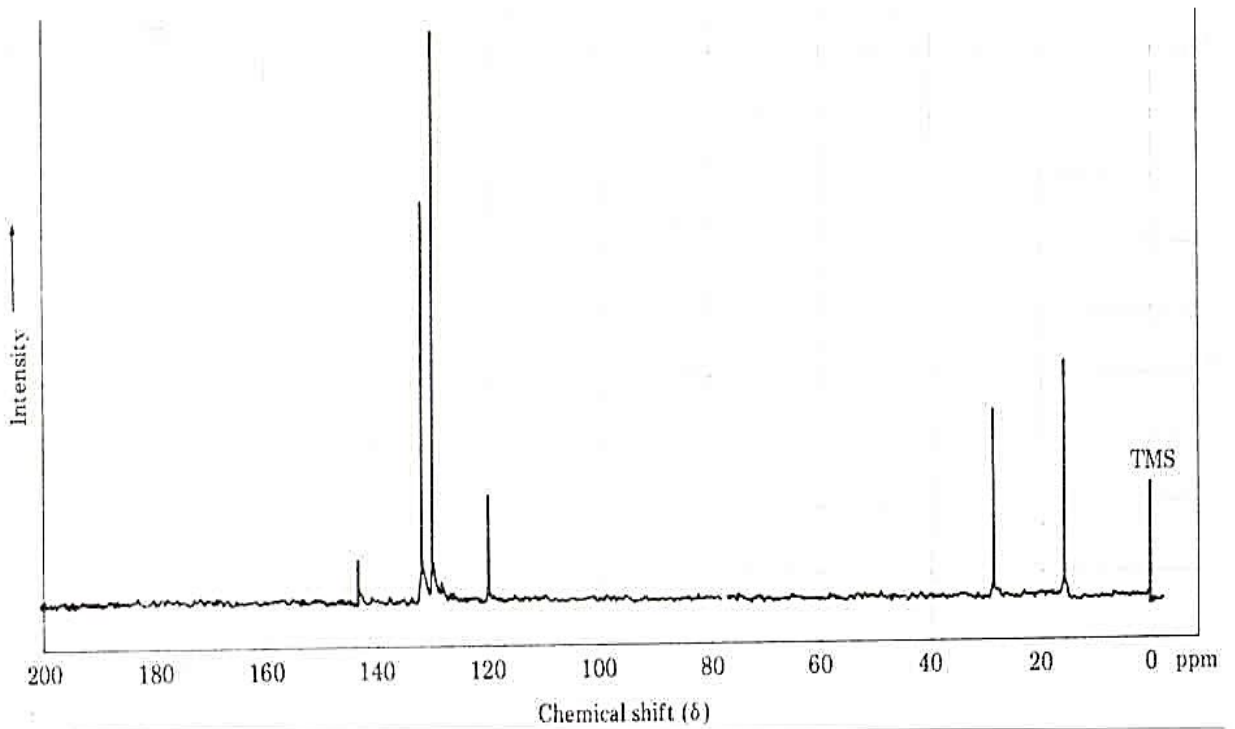
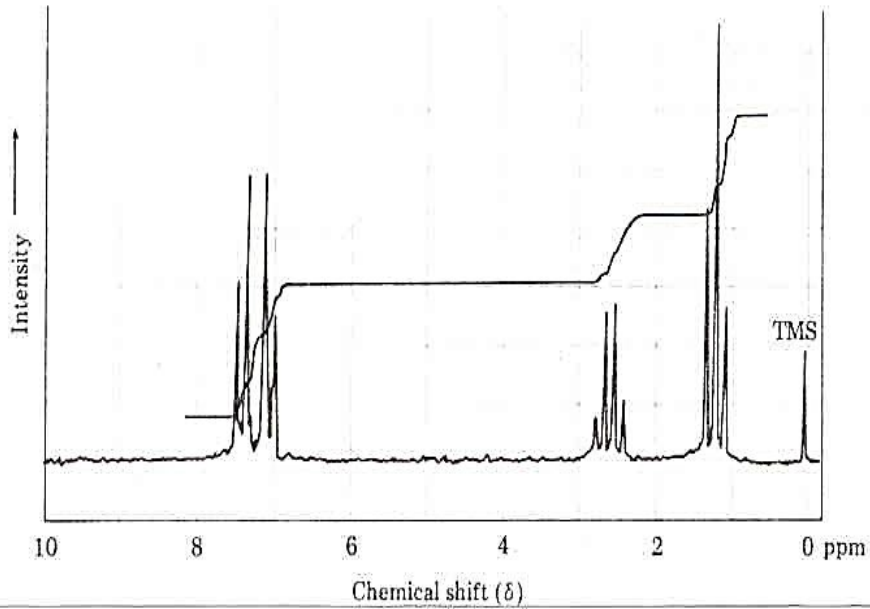
Alıştırma

23 Şekil 49 molekül formülü $C_5H_7O_2Br$ olan bir esterin ^{13}C spektrumlarını göstermektedir. Bu bileşiğin yapısı nedir?



Şekil 49 Soru 23 için ^{13}C spektrumları

Alıştırma 24 Aşağıdaki ^1H ve ^{13}C nmr spektrumlarını $\text{C}_8\text{H}_9\text{Br}$ maddesi için yorumlayınız?



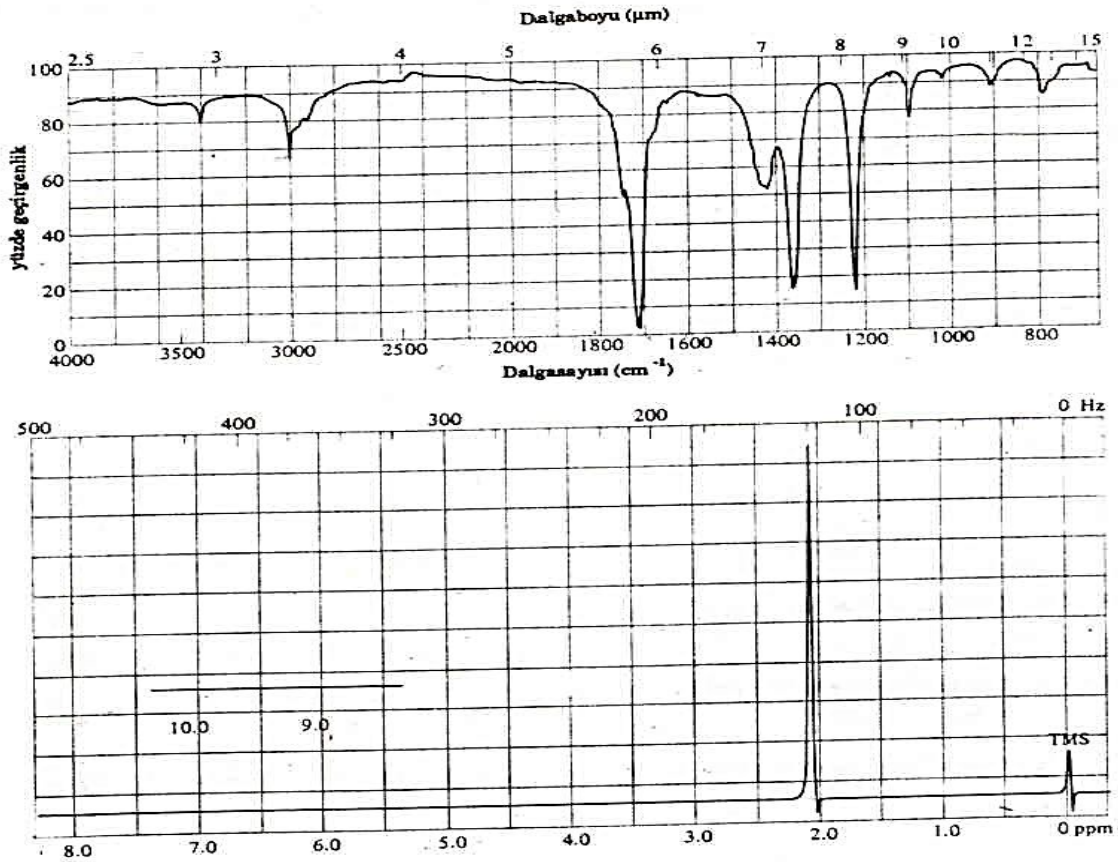
Organik Yapıların Tanınmasında İnfrared ve Nmr Spektrumlarının Kullanılması

Örnekler

- 2- Bir bileşiğin molekül formülü C_3H_6O 'dir. İnfrared ve 1H nmr spektrumları Şekil 50'de verilmiştir. Bu bileşiğin yapısı nedir?

Çözüm:

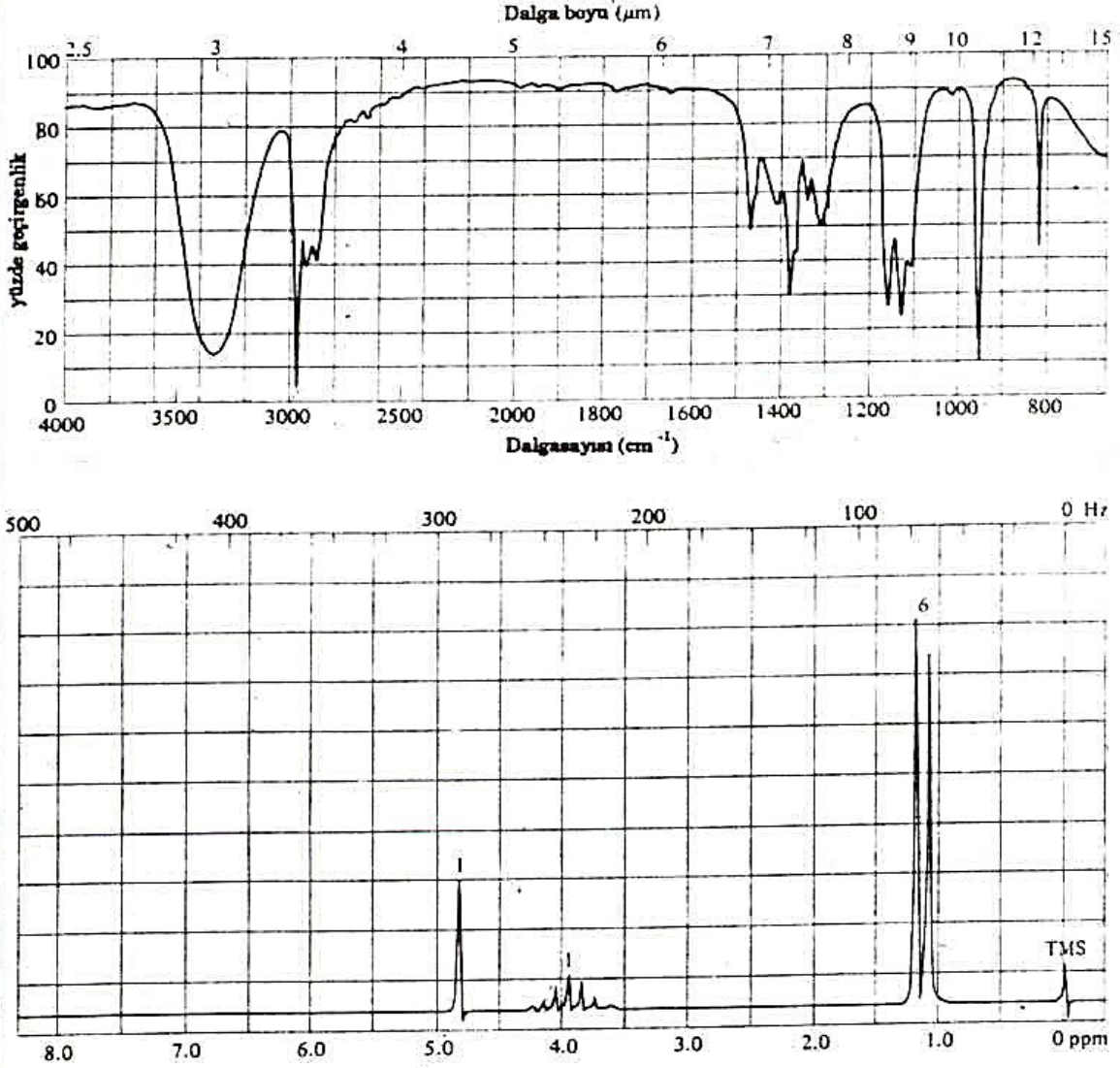
Molekül formülünden bileşiğin bir oksijeni olduğunu biliyoruz; bu nedenle bileşik bir alkol, bir aldehit ya da bir keton olmalıdır. Molekül formülü $C_nH_{2n}O$ türünde olduğu için yapının ya bir ikili bağ ($C=C$ veya $C=O$) ya da bir halka içerdiğini biliyoruz. Olası işlevsel gruplar arasında ayırım yapmak için infrared spektrumunu kullanırız. 1750 cm^{-1} ($5.8\text{ }\mu\text{m}$) $C=O$ bölgesinde kuvvetli bir soğurma görürüz. Oksijenin bir hidroksil grubu ya da eter grubunda değil fakat daha çok bir karbonil grubunda (aldehit ya da keton) olduğu sonucunu çıkarırız. Bu da bir halka olmadığı anlamındadır.



Şekil 50 C_3H_6O için spektrumlar, Örnek Soru.

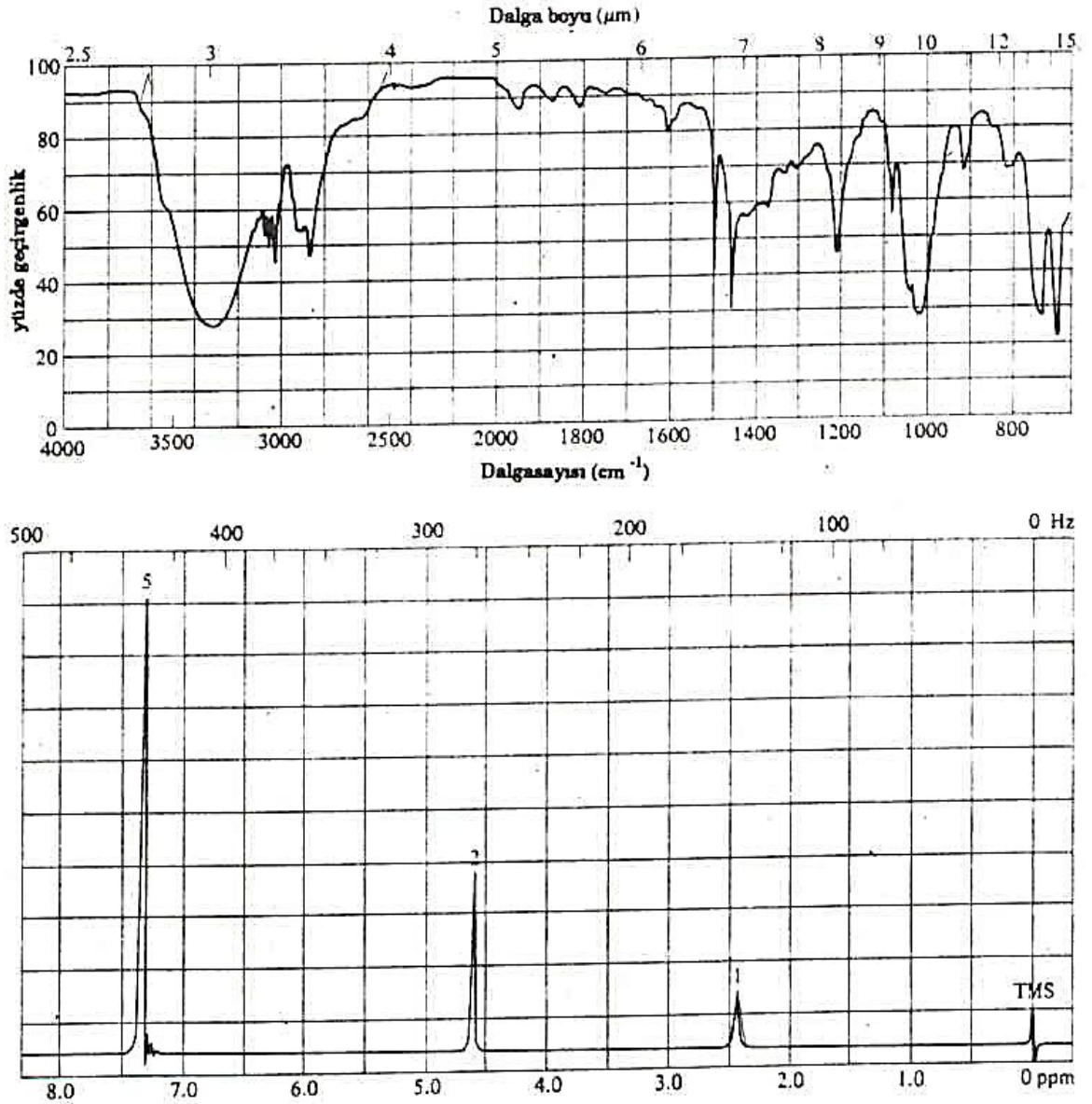
Alıřtırmalar

25. Bir bileřiřin molek l form l  C_7H_8O 'dir. İnfrared ve 1H nmr spektrumları řekil 51 da g sterilmiřtir. Bu bileřiřin yapısı nedir?



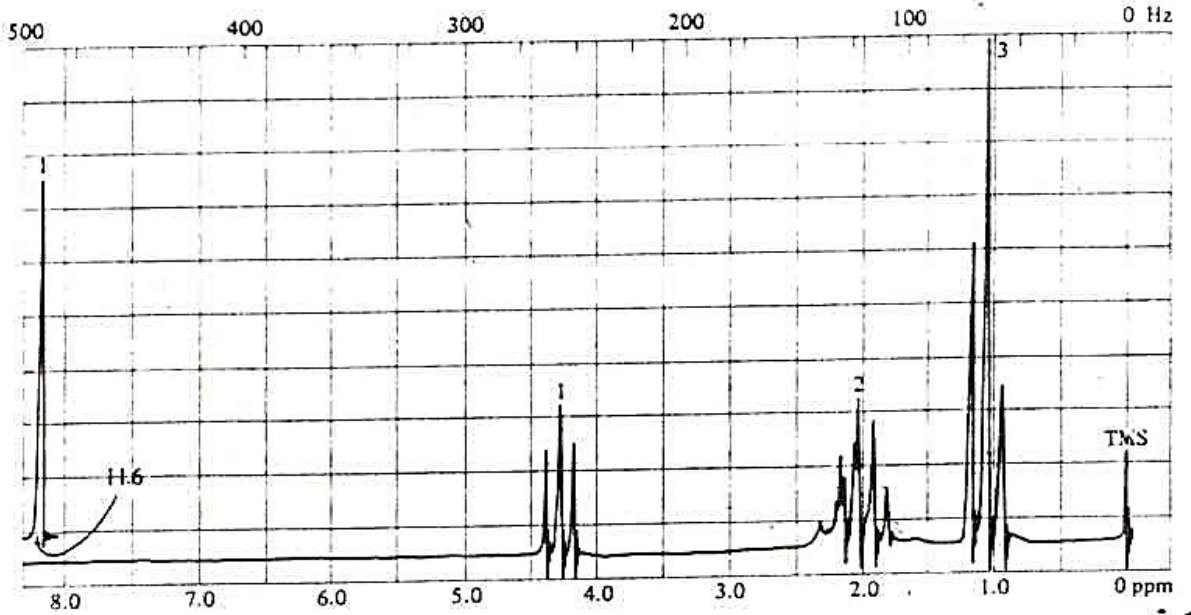
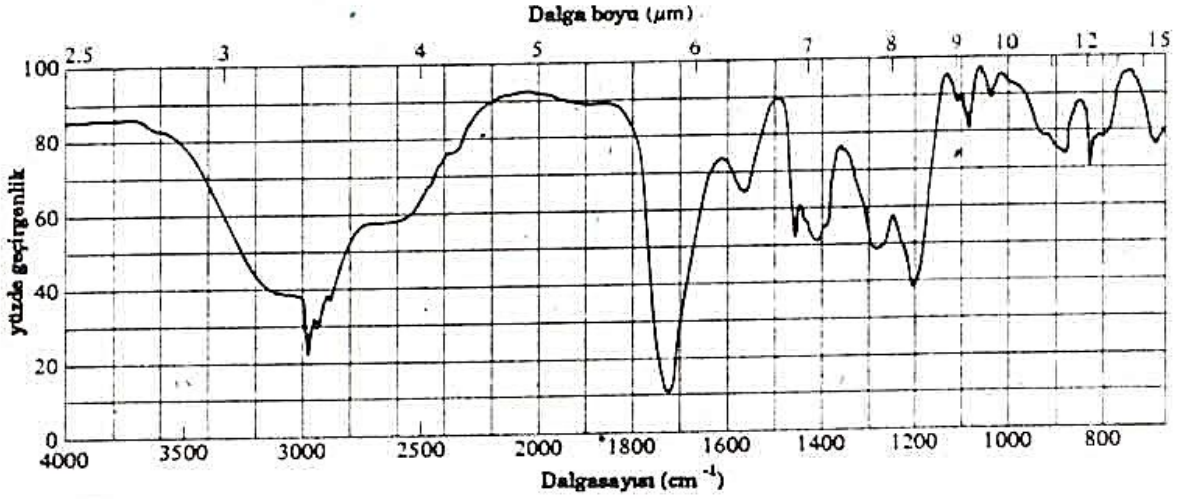
řekil 51, Problem 25 'deki C_7H_8O i in spektrumlar

26. Şekil 52 molekül formülü C_7H_8O olan bileşik için infrared ve 1H nmr spektrumlarını göstermektedir. Bu bileşiğin yapısı nedir?



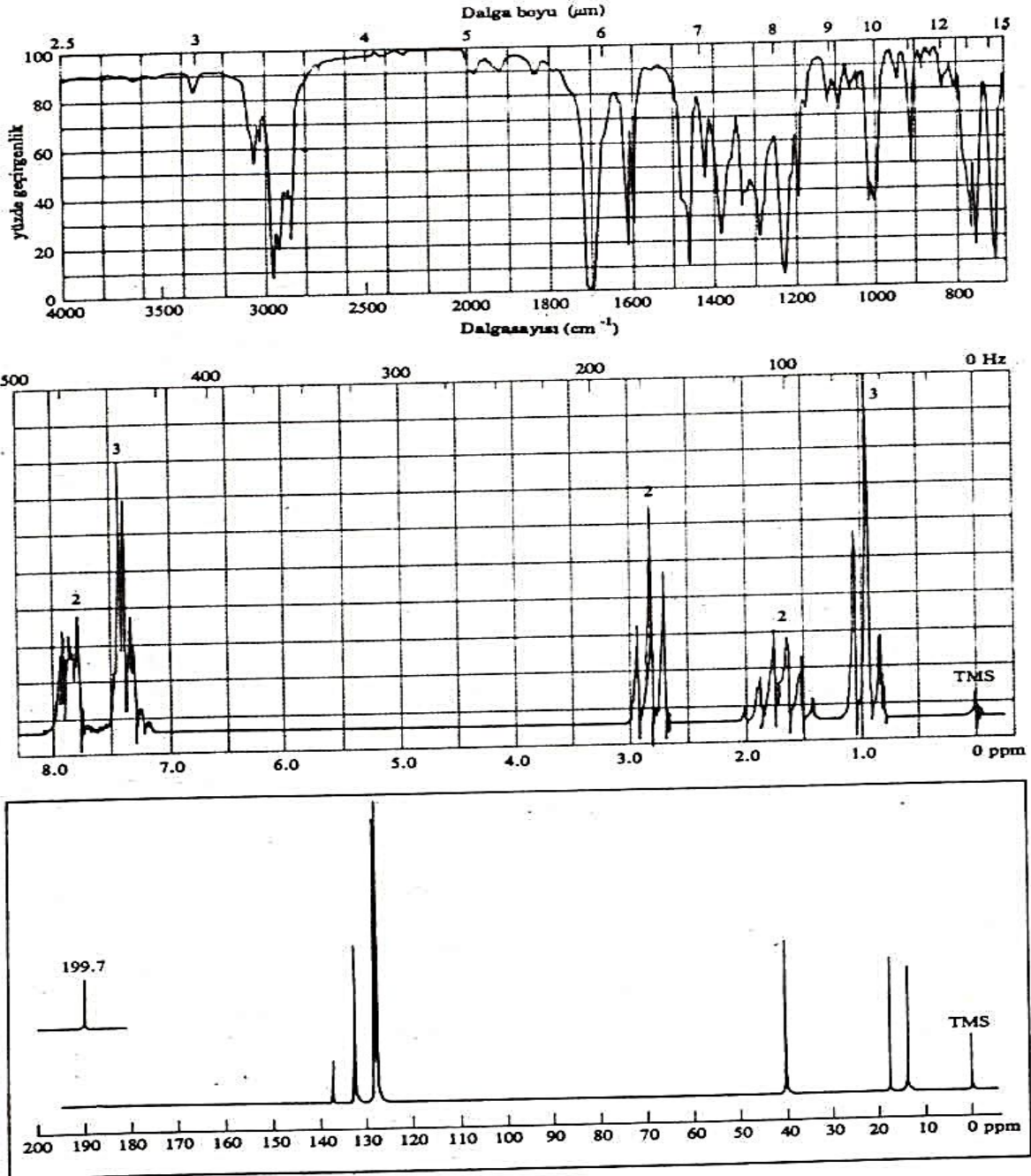
Şekil 52. Problem 26'daki C_7H_8O için spektrumlar

27 Şekil 53 moleköl formölü $C_4H_7ClO_2$ olan bir bileşik için 1H nmr ve infrared spektrumlarını göstermektedir. Bileşiğin yapısı nedir?



Şekil 53 Problem 27'deki $C_4H_7ClO_2$ için spektrumlar

28 Şekil 54 molekül formülü $C_{10}H_{12}O$ olan bir bileşik için infrared spektrumu, 1H nmr spektrumu ve proton-eşleşmemiş ^{13}C nmr spektrumunu göstermektedir. Bileşiğin yapısı nedir?

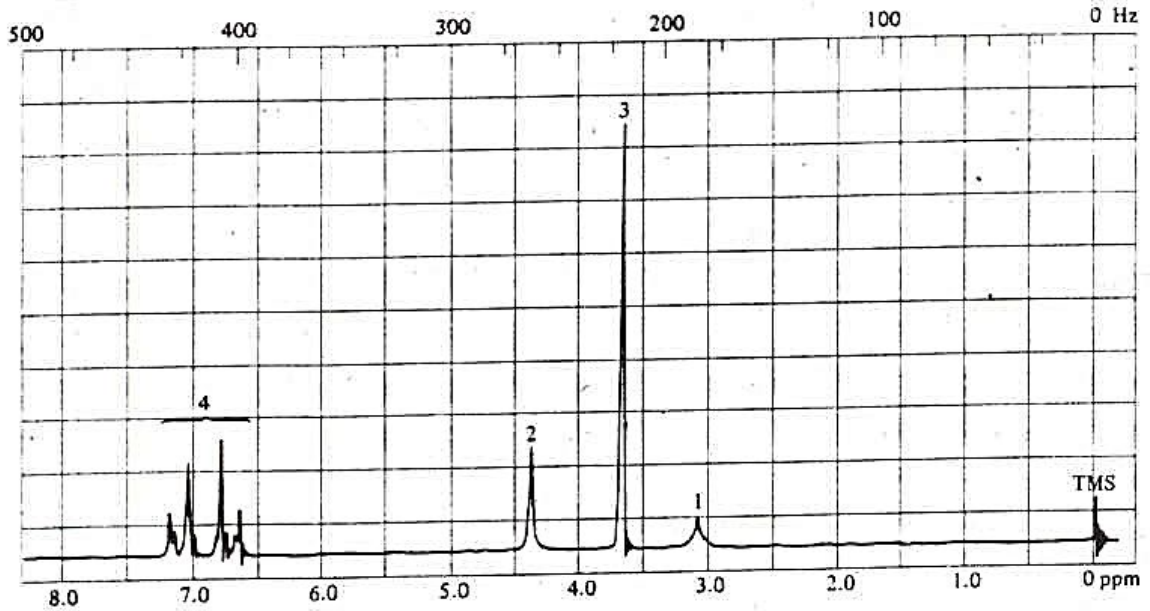
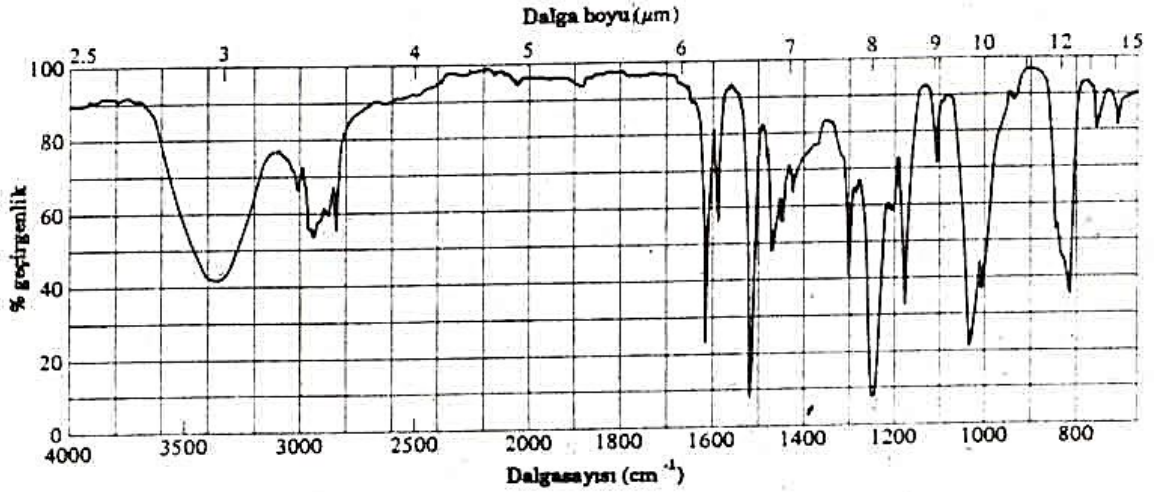


Şekil 54 Problem 28 'deki $C_{10}H_{12}O$ için infrared spektrumu, 1H nmr spektrumu ve proton-eşleşmemiş ^{13}C nmr spektrumu

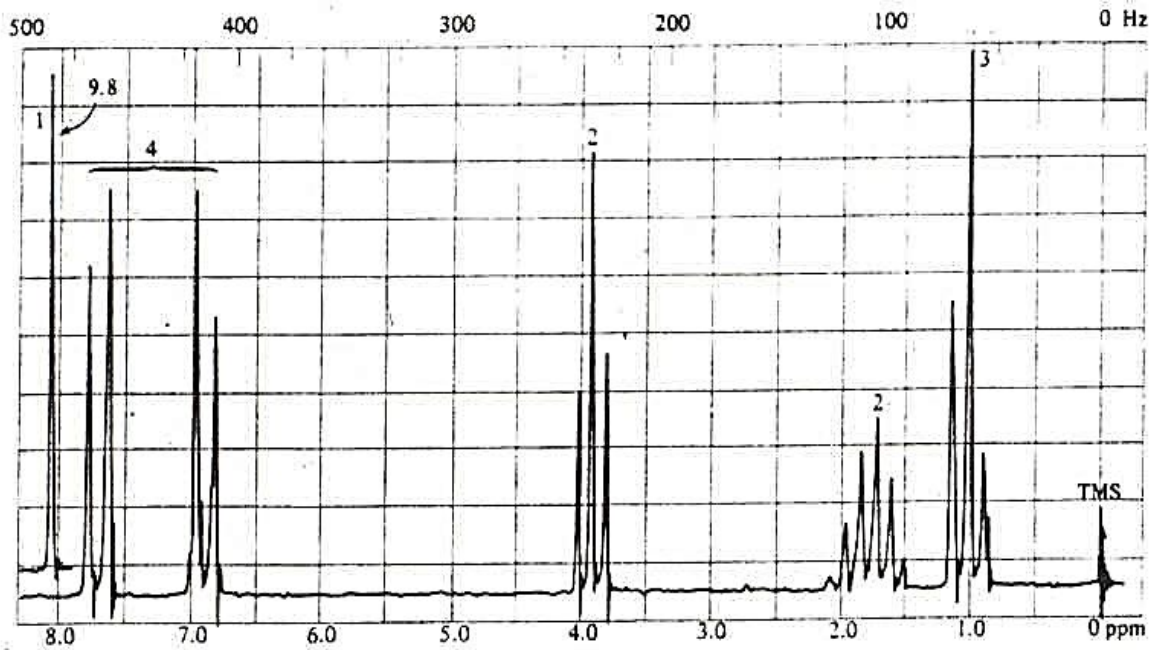
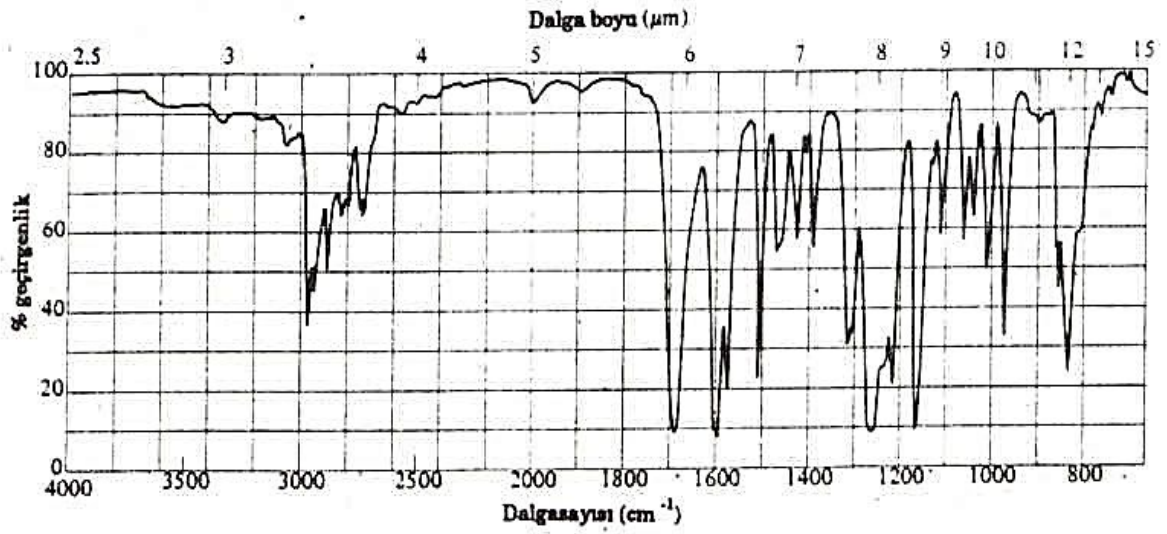
29. Aşağıdaki bileşiklerin yapısını belirleyin:

- (a) Bir alkolün ($C_5H_{12}O$) 1H nmr spektrumu şu soğurmayı gösterir: bir singlet (bağlı alan 1); iki dublet (alanlar 3 ve 6); ve iki multiyet (her iki alan da 1). Alkol HBr ile etkileştirildiğinde bir alkil bromür ($C_5H_{11}Br$) verir. Bunun nmr spektrumu yalnızca bir singlet (alanı 6); bir triplet (alanı 3); ve bir kuartet (alanı 2) gösteriyor. Alkol ve alkil bromürün yapıları nedir?
- (b) Bir bileşik (C_4H_7NO) 3000 cm^{-1} ($3,33\text{ }\mu\text{m}$)'de orta şiddette ve 2240 cm^{-1} ($4,46\text{ }\mu\text{m}$) de zayıf bir infrared soğurma verir. Bir diğer soğurma da parmakızı bölgesindedir. 1H nmr spektrumu bir triplet ($\delta\ 2.6$), bir singlet (3.3), ve bir triplet (3.5) gösterir. Bu sinyallerin alan oranı 2 (triplet):5 (singlet ve ikinci triplet kombine)dir.
- (c) Yalnızca C, H ve O içeren bir bileşik (molekül ağırlığı 122) aşağıdaki 1H nmr soğurmasını gösterir: singlet ($\delta\ 2.15$), singlet (3.45) ve dört piklik bir grup (6.7 civarında toplanmış); alan oranı 3:3:4.
- (d) Molekül formülü $C_5H_{10}O_2$ olan bir bileşik 1750 cm^{-1} ($5.71\text{ }\mu\text{m}$)'de kuvvetli infrared soğurma gösterir. Nmr spektrumu bir dublet ($\delta\ 1.2$), bir singlet (2.0) ve bir septet (4.95) gösterir; alan oranı 6:3:1.
- (e) Bir bileşik ($C_8H_{12}O_2$) temel infrared soğurmasını $2900-3050\text{ cm}^{-1}$ ($3.28-3.45\text{ }\mu\text{m}$), 1760 cm^{-1} ($5.68\text{ }\mu\text{m}$), 1460 cm^{-1} ($6.85\text{ }\mu\text{m}$), ve 1380 cm^{-1} ($7.25\text{ }\mu\text{m}$)'de gösterir. 1H nmr spektrumu $\delta\ 1.3$ 'de yalnızca bir singlet gösterir.

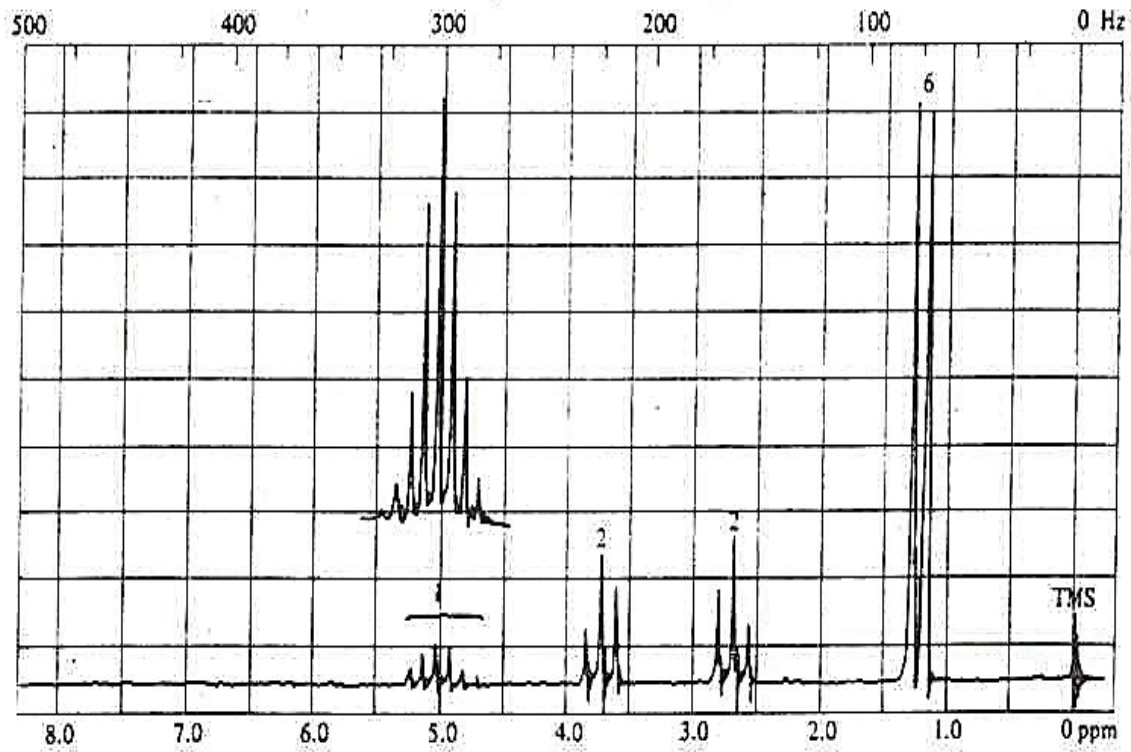
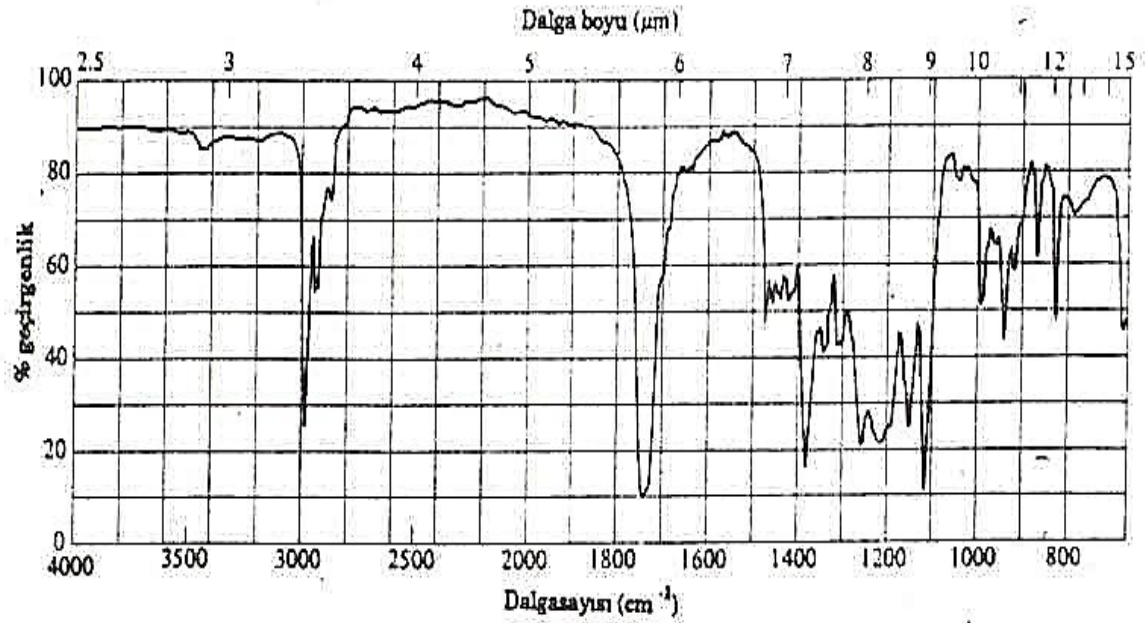
30. 55'den 61'a kadar olan şekillerin herbiri bilinmeyen bir bileşik için bir moleküler formül, bir infrared spektrumu ve bir ^1H nmr spektrumu vermektedir. Her bir bileşiğin yapısı nedir?



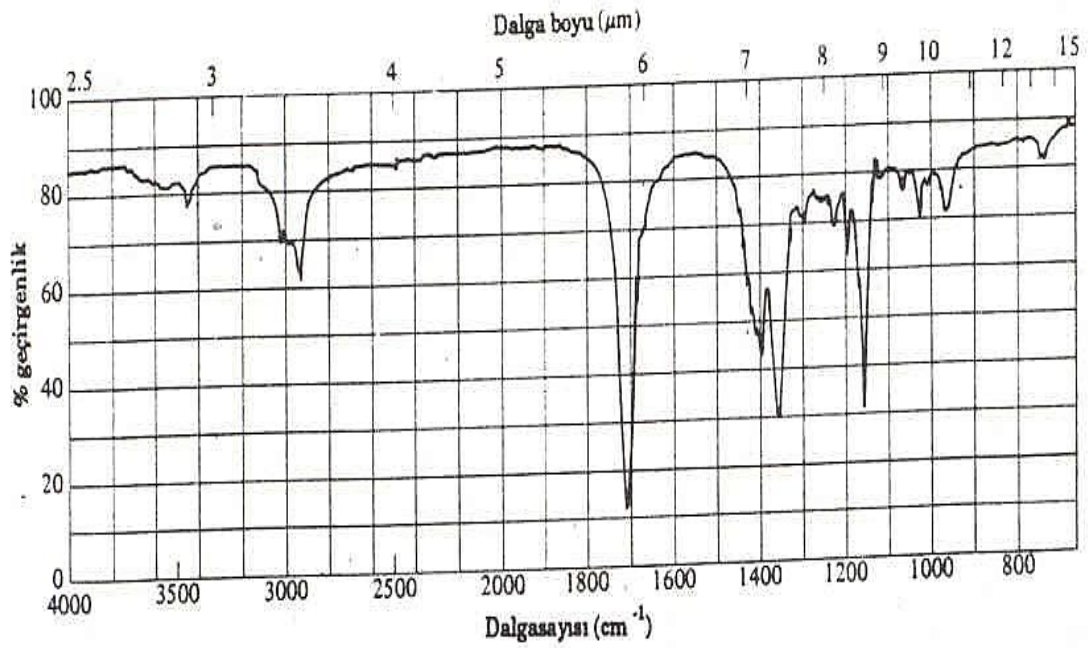
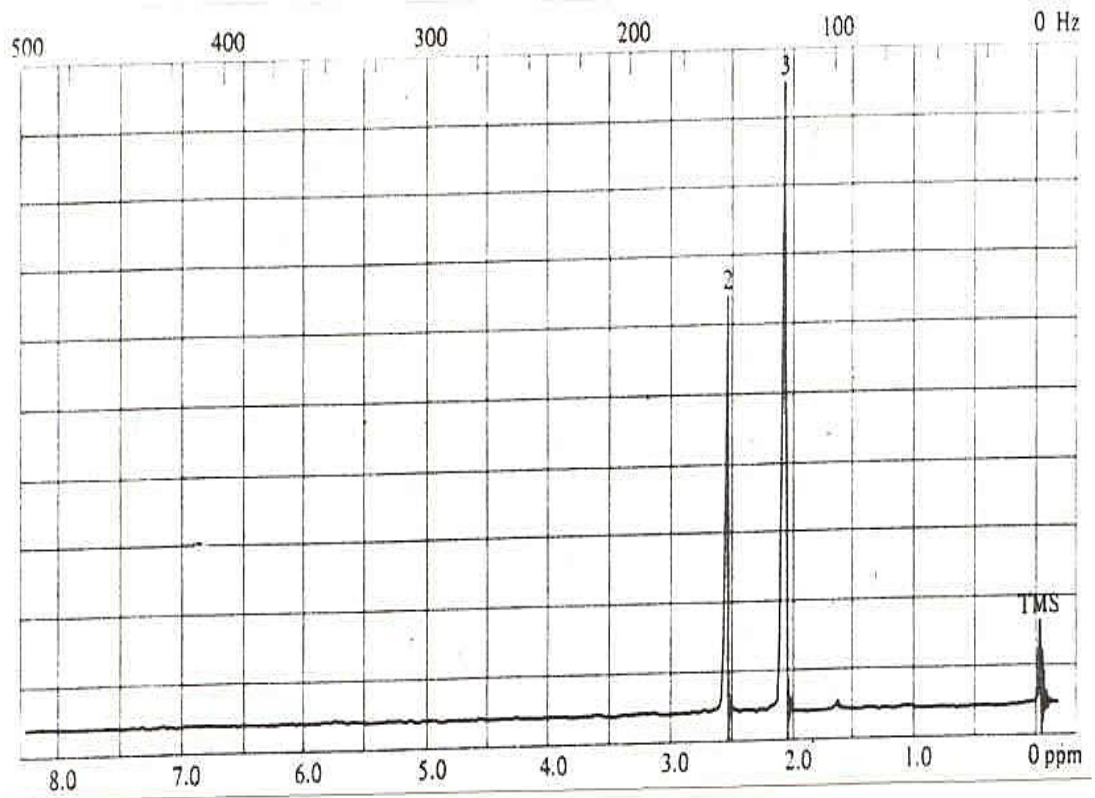
Şekil 55 (a) Problemi için spektrumlar: $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_2$



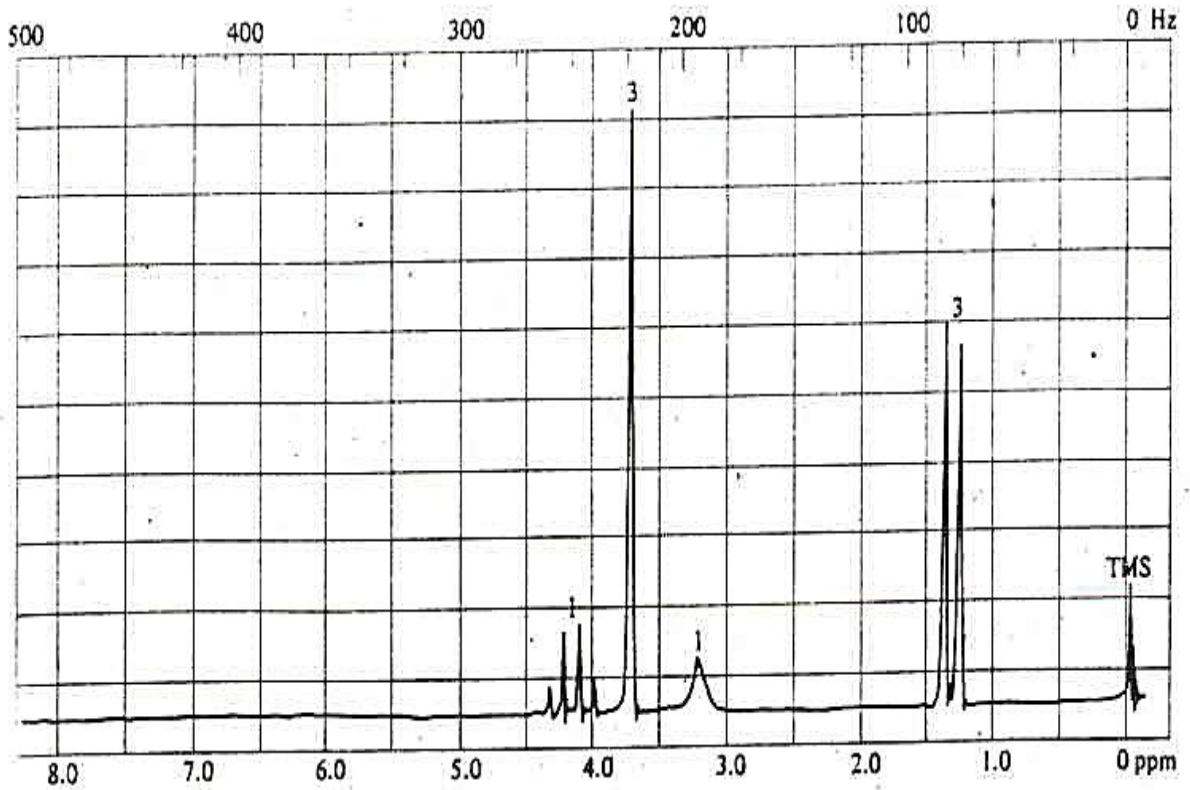
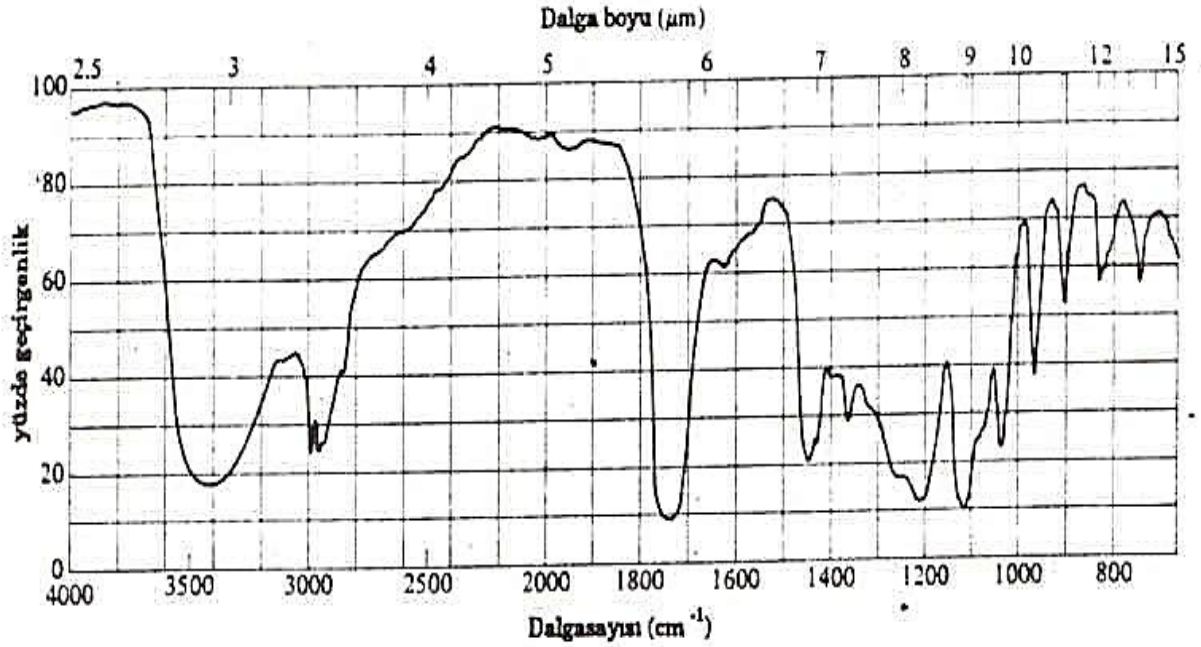
Şekil 56 Problem 29 (b) için spektrumlar: $C_{10}H_{12}O_2$



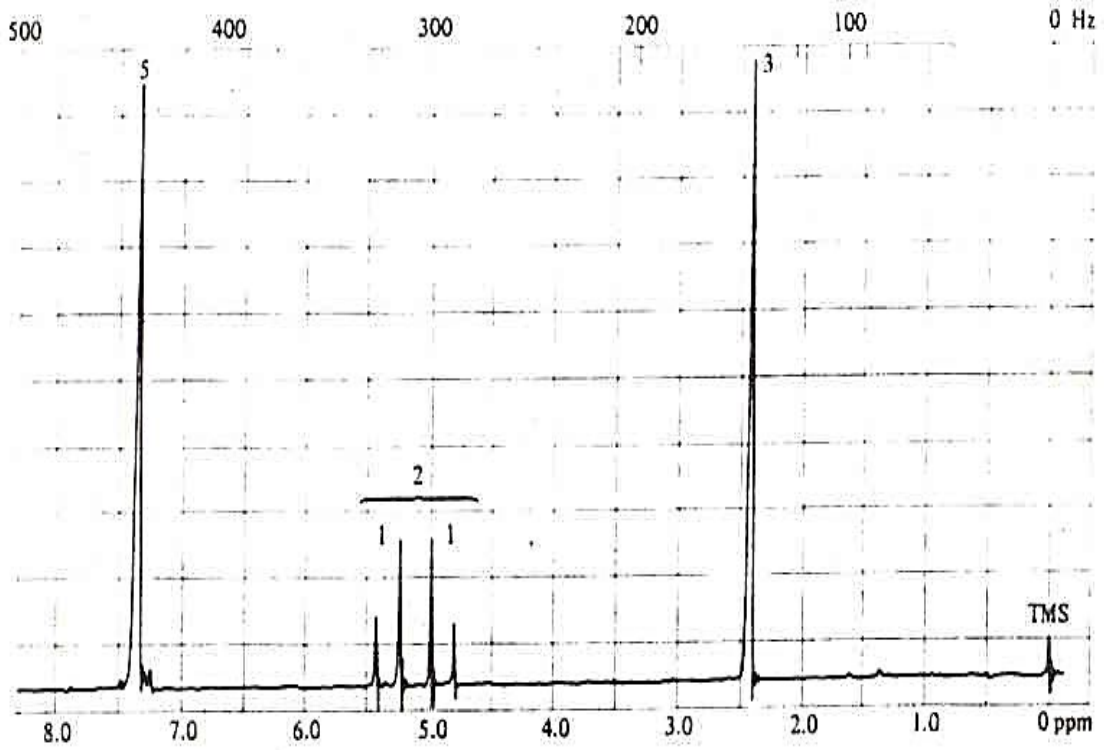
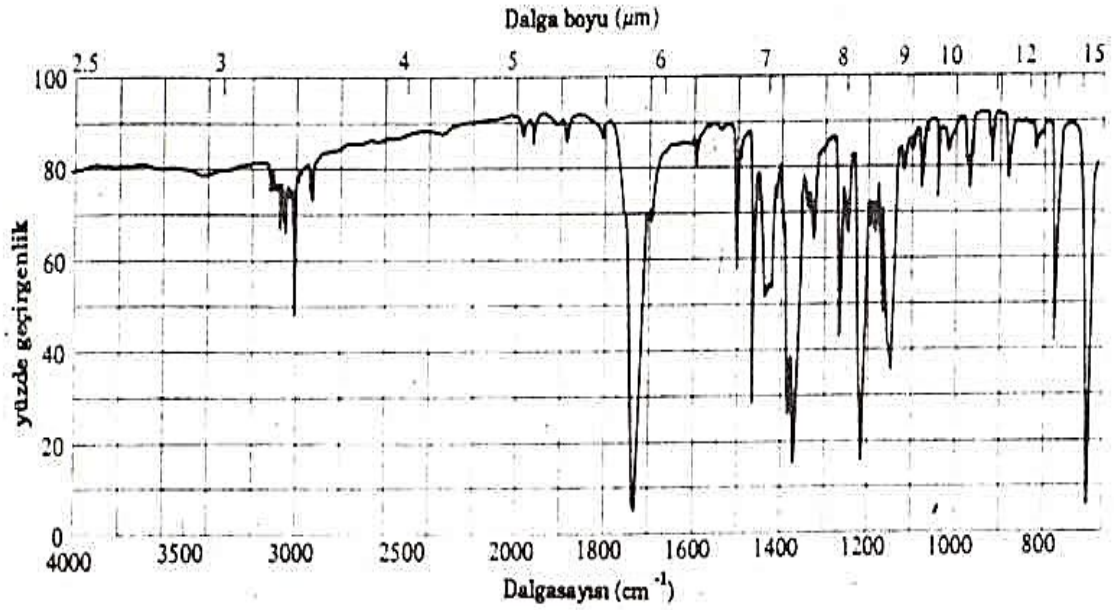
Şekil 57 Problem 29 (c): $C_6H_{11}O_2Cl$ için spektrumlar



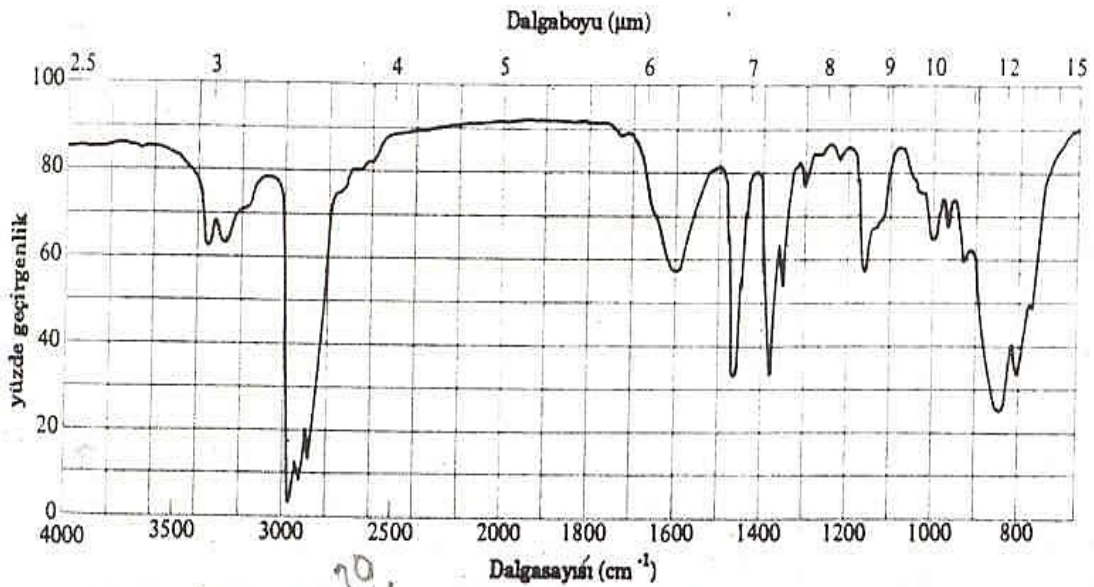
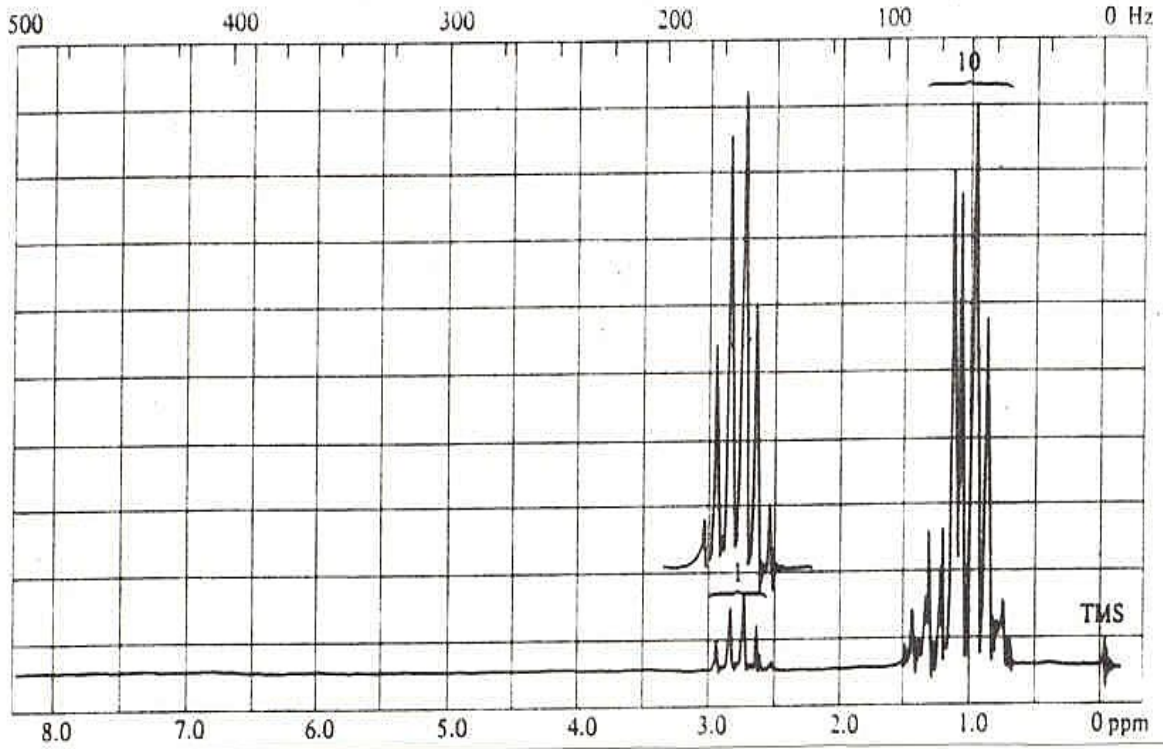
Şekil 58 Problem 29 (d) : $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_2$



Şekil 59 Problem 29(e) : $C_4H_8O_3$ için spektrumlar

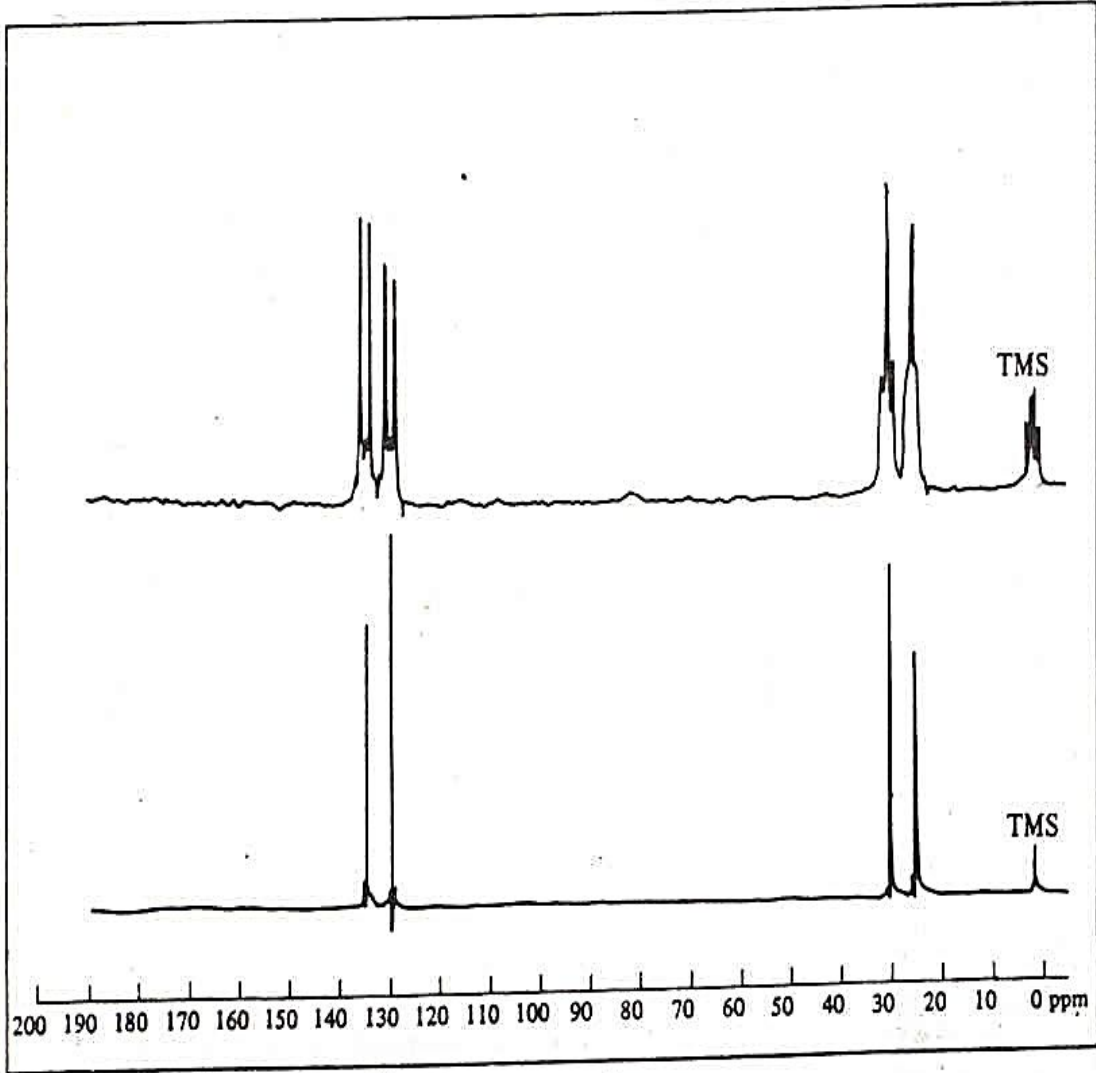


Şekil 60 Problem 79 (f) : $\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{Br}_2\text{O}$ için spektrumlar

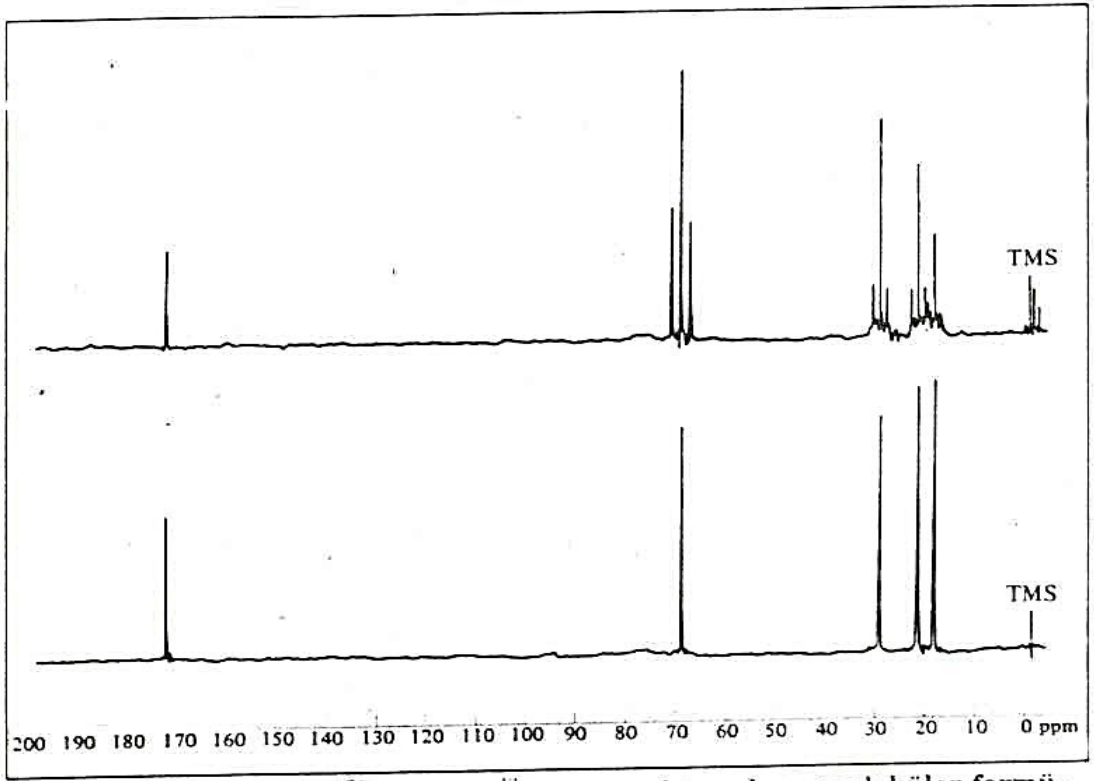


Şekil 69 Problem 30 (g) : $C_4H_{11}N$ için spektrumlar

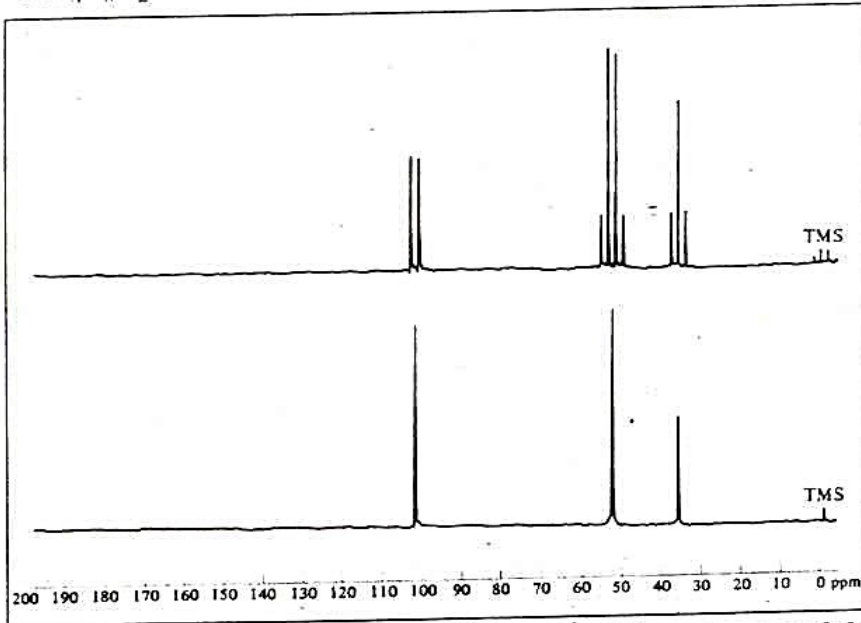
30. 61-63 şekilleri bilinmeyen yapıdaki bileşiklere ilgilendiren ek bilgi ile birlikte ^{13}C nmr spektrumlarını göstermektedir. Bu bileşiklerin yapıları nedir?



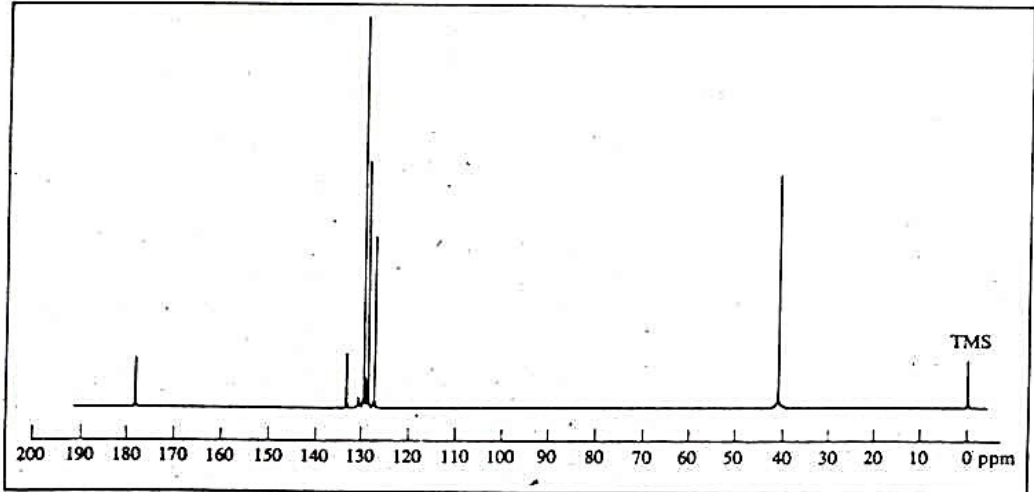
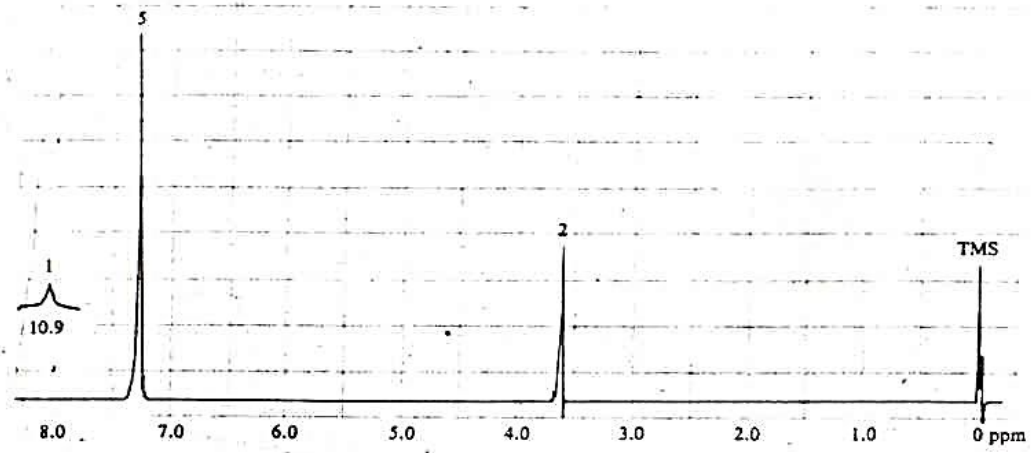
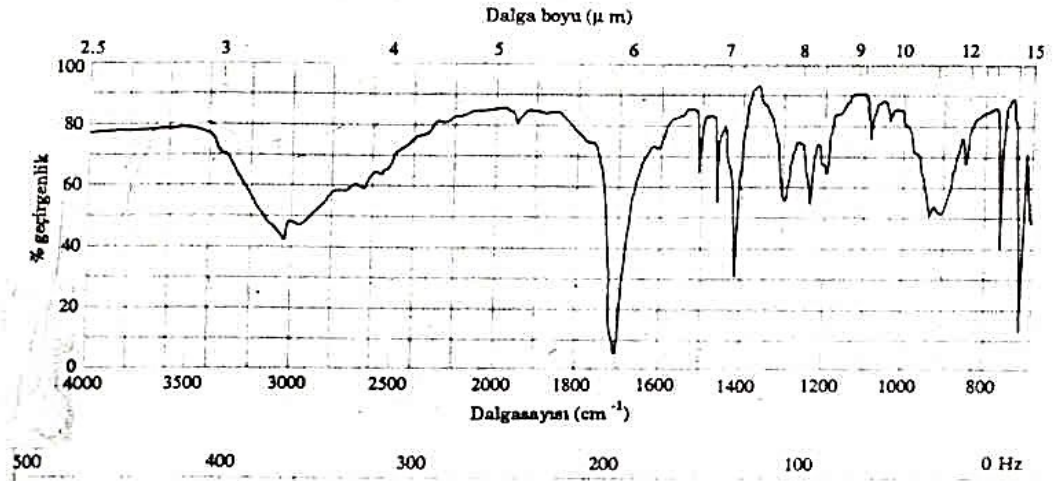
Şekil 61 Problem 30 (a) : C_8H_{12} için ^{13}C nmr spektrumları



Şekil 62 Problem 30 (b) için ^{13}C nmr spektrumları : moleküler formülü $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$ olan bir ester.

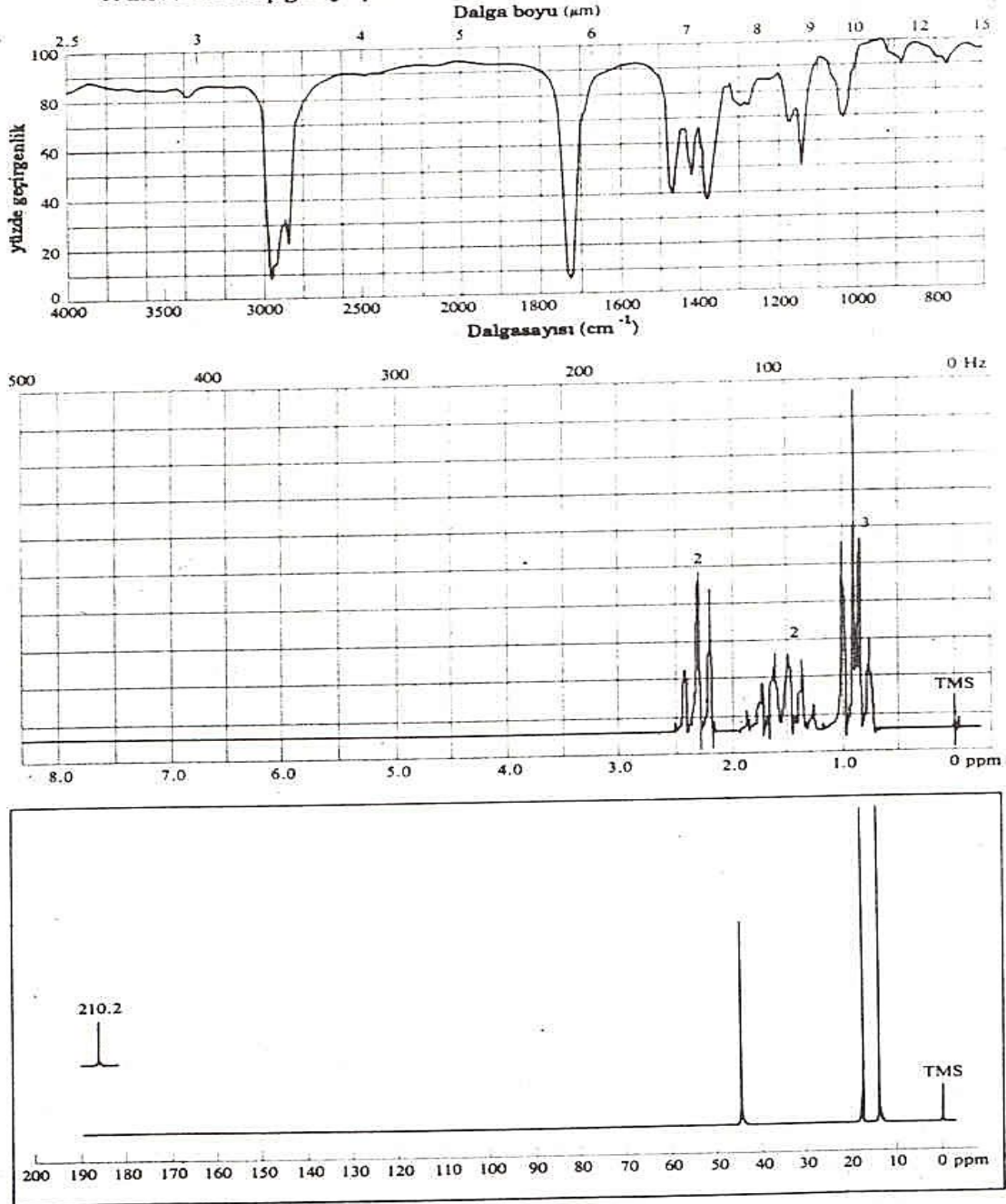


Şekil 63 Problem 30 (c) için ^{13}C nmr spektrumları : moleküler formülü $\text{C}_7\text{H}_{16}\text{O}_4$ olan bir bileşik. Bu bileşiğin proton nmr spektrumu bağlı alanlar oranı 1:6:1 olan bir triplet (δ 1.95), bir singlet (3.3) ve bir triplet (4.5) gösterir.



Şekil 6% C₈H₈O₂ için infrared spektrumu, ¹H nmr spektrumu ve proton-eşleşmemiş ¹³C nmr spektrumu

32. Şekil 65 molekül formülü $C_7H_{14}O$ olan bir bileşik için infrared spektrumu, 1H nmr spektrumu, ve proton-eşleşmemiş ^{13}C nmr spektrumunu göstermektedir. Bu bileşiğin yapısı nedir?



Şekil 65 Problem 32'deki $C_7H_{14}O$ için infrared spektrumu, 1H nmr spektrumu ve proton-eşleşmemiş ^{13}C nmr spektrumu.

32 ^{13}C NMR spektrumu Şekil 66 da görülen bir hidrokarbon metilsikloheksan iskeleti ve bir çift bağ içermektedir. Çift bağın yapıdaki yerini belirleyiniz.

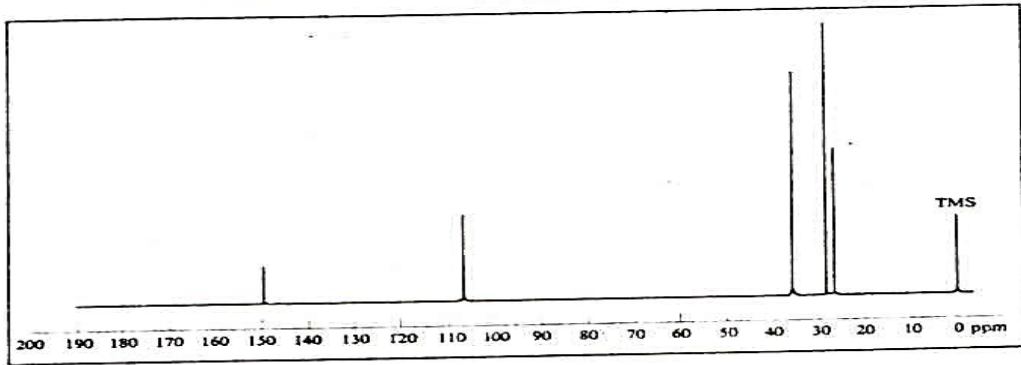
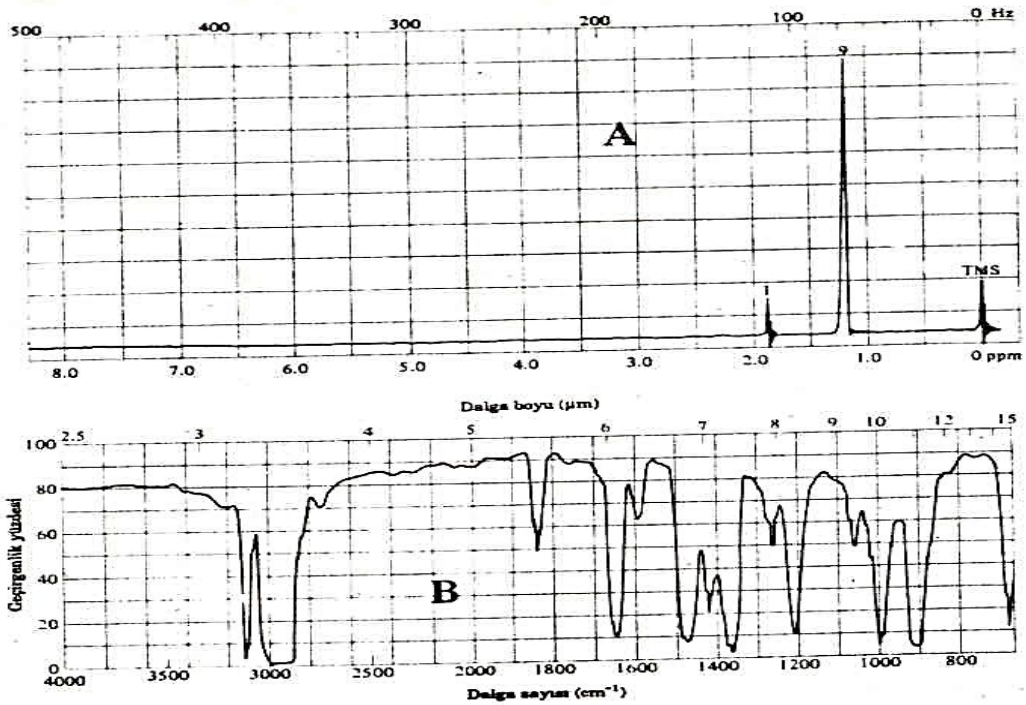


Figure 10.16 ^{13}C nmr spectrum for Problem 10.85.

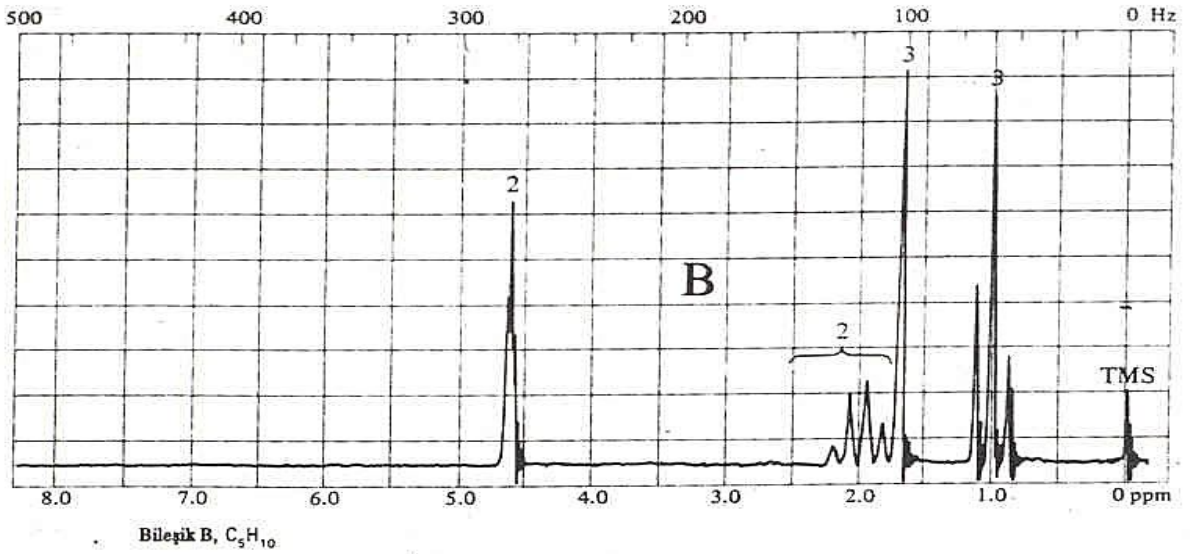
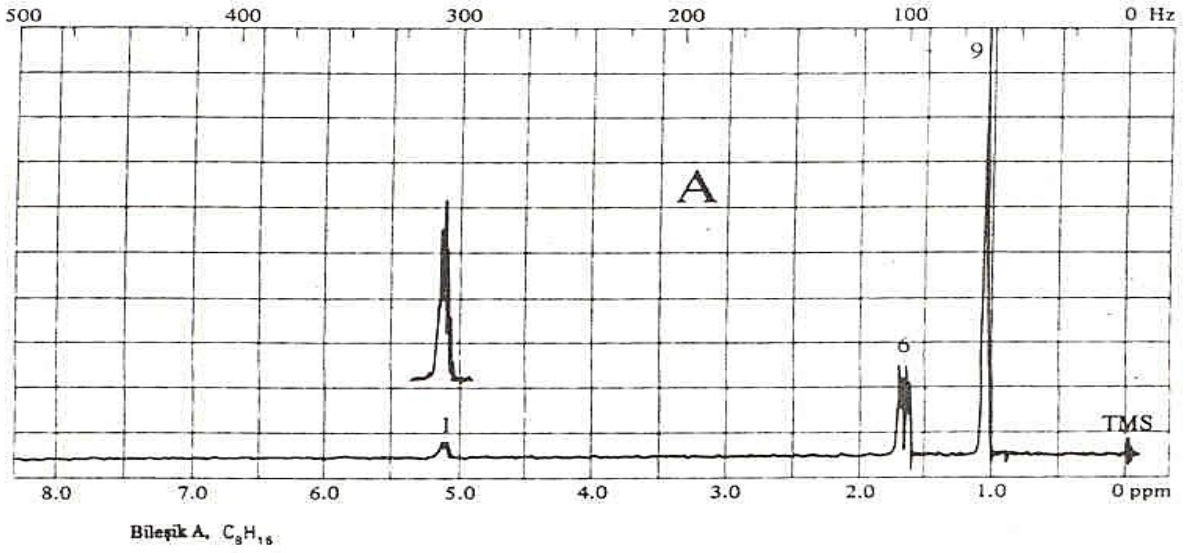
Şekil 66 Soru 32 ile ilgili ^{13}C NMR spektrumu

33 Altı karbonlu A bileşiği hidrojenlenerek B bileşiğine dönüştürülebilir. A'nın proton NMR spektrumu ve B'nin IR spektrumu Şekil 67 de görülmektedir. A ve B'nin yapısal formüllerini bulunuz.

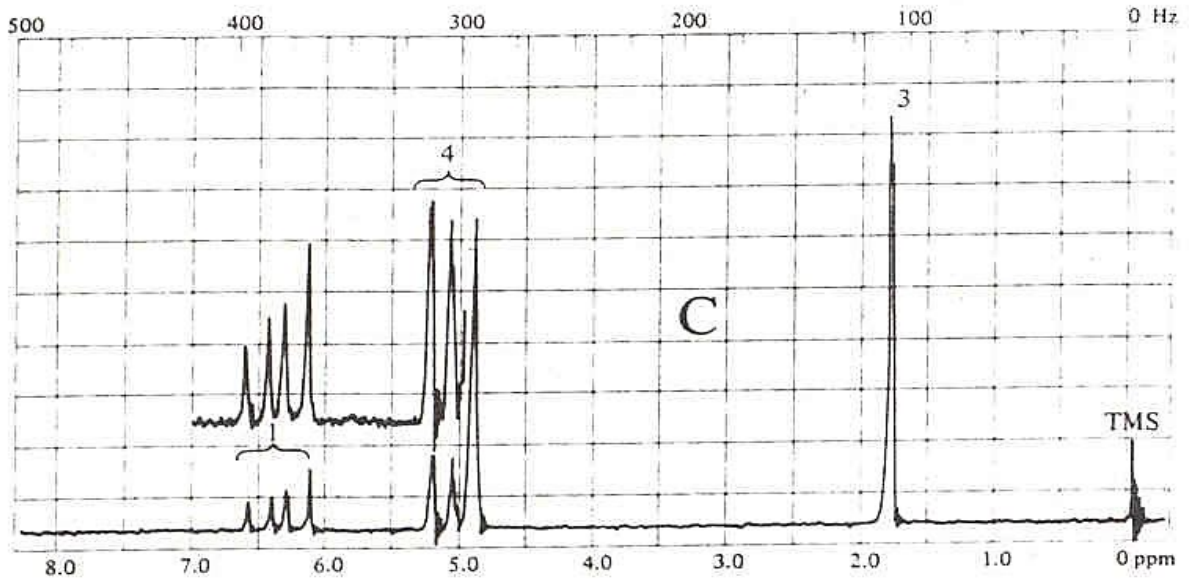


Şekil 67 Soru 33 ile ilgili spektrumlar

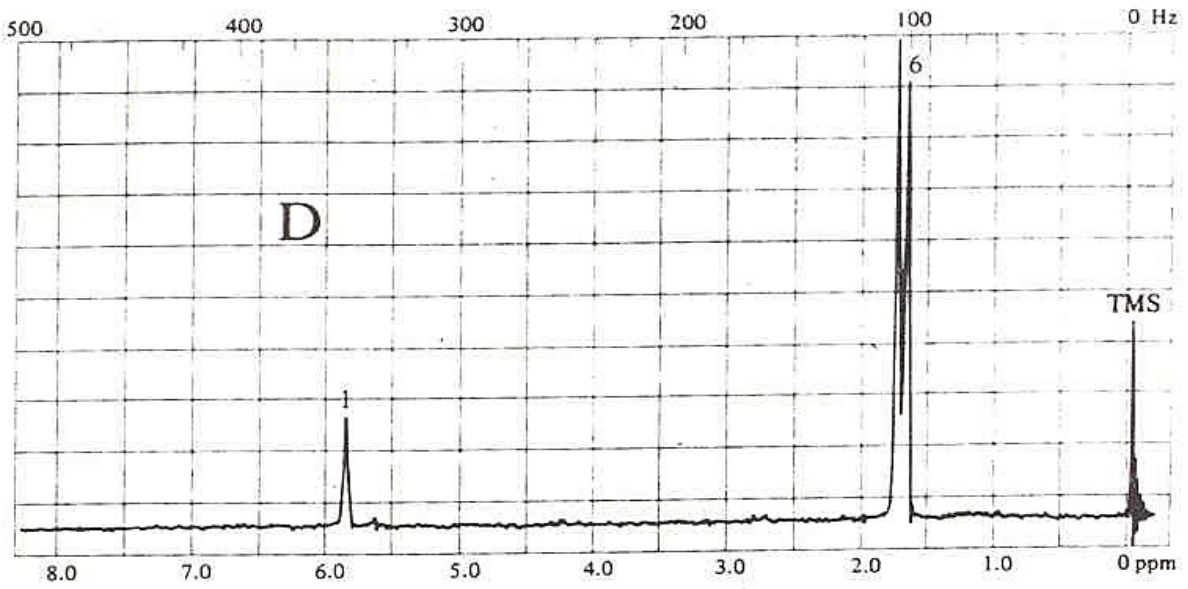
Şekil 68 de spektrumları verilen bileşiklerin yapısal formüllerini yazınız.



Şekil 68 Soru 36 ile ilgili 1H NMR spektrumları



Bileşik C, C_5H_8

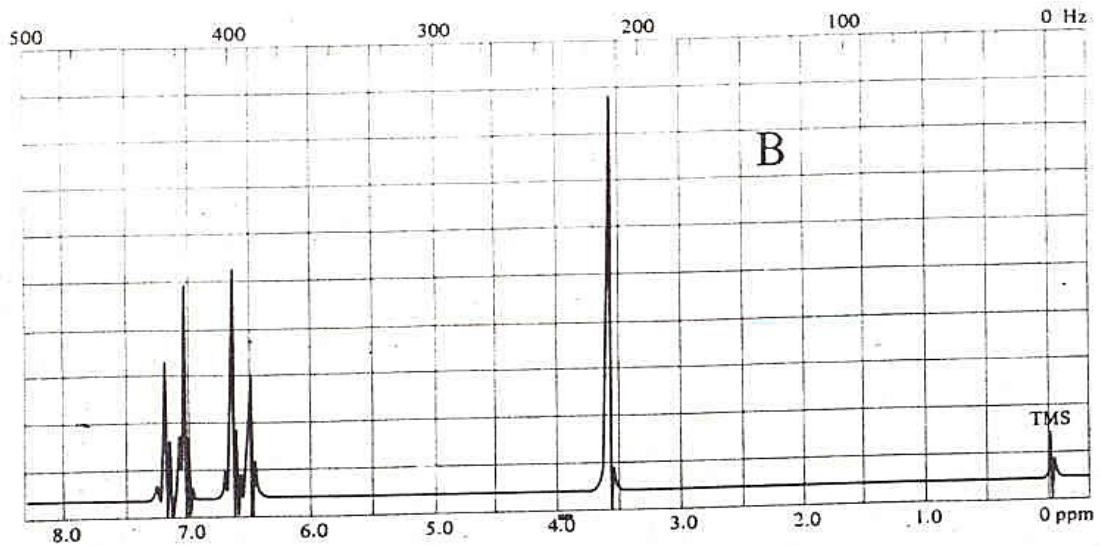
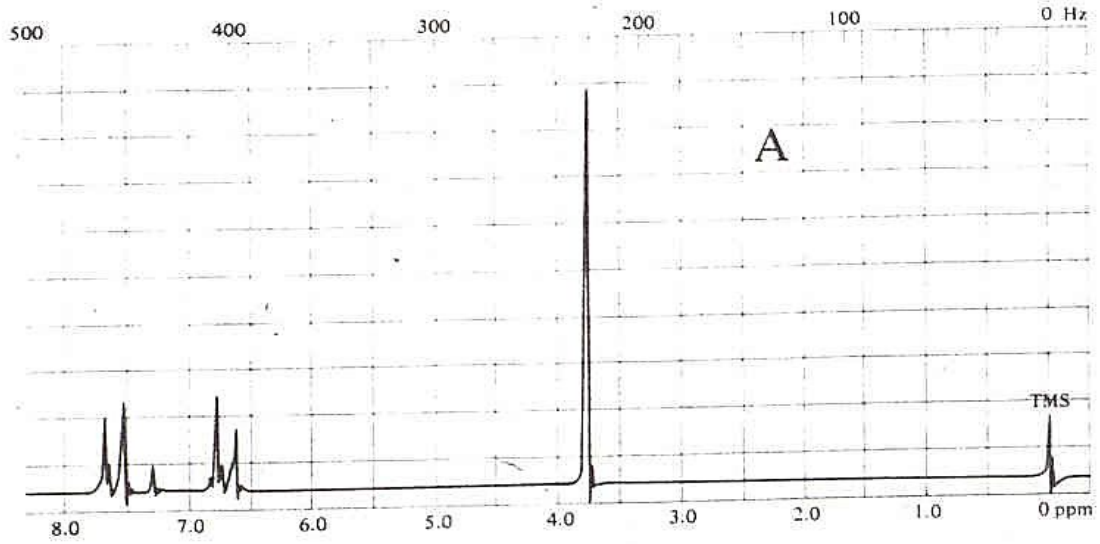


Bileşik D, C_8H_{14}

Şekil 69 Soru 36 ile ilgili 1H NMR spektrumları

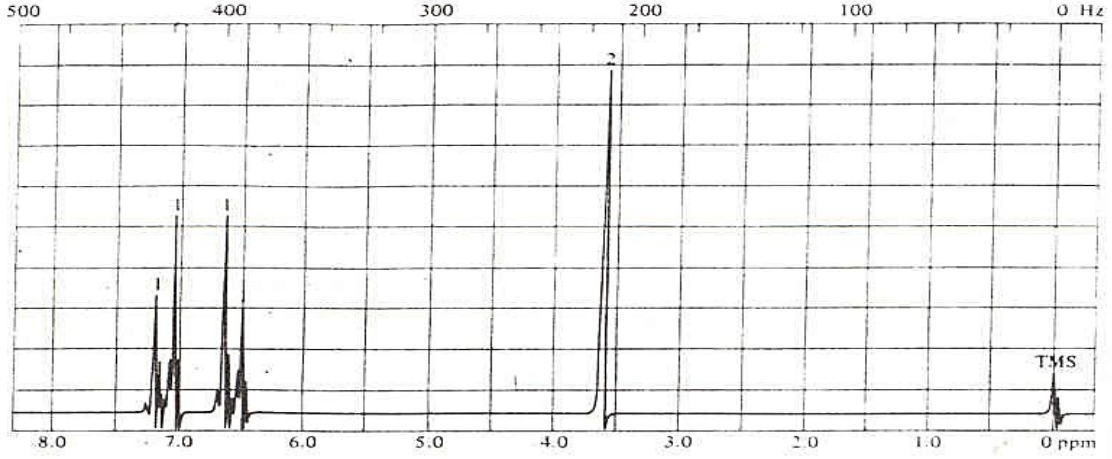
Alıştırma

38 Şekil 70 iki nmr spektrumu göstermektedir (piklerin altında bağlı alanlar gösterilmemiş). Spektrumlardan biri p-kloranilin, diğeri p - iyotanisolündür ($p\text{-IC}_6\text{H}_4\text{OCH}_3$). Kimyasal kayma değerlerinden (benzen protonlarının kimyasal kayma değerleri ile karşılaştırarak) spektrumun hangi bileşiğe ait olduğunu belirtiniz.



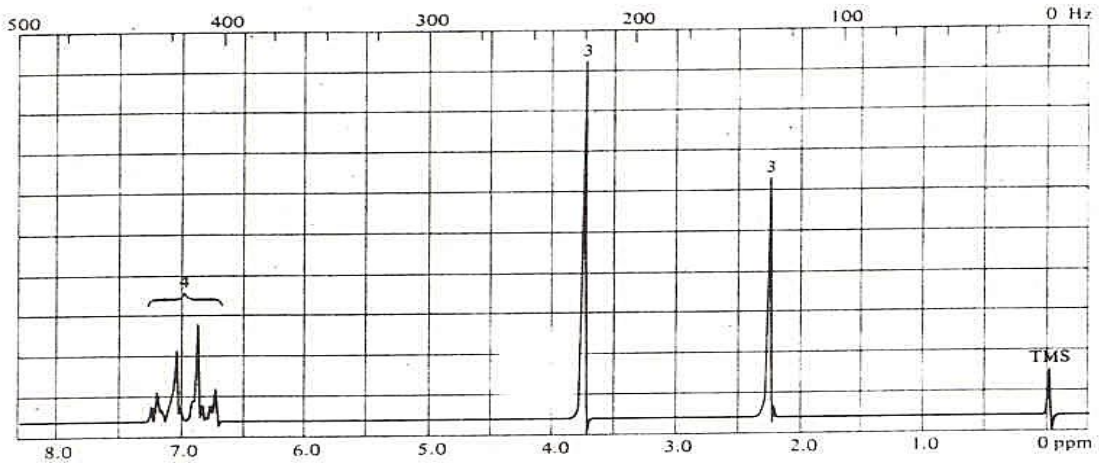
Şekil 70 p-Kloranilin p-iyotanisolün Problem 38 için ^1H nmr spektrumu

34 Kapalı formülü C_6H_5Cl olan bir bileşik HNO_3 ve H_2SO_4 ile etkileştiriliyor. Bu tepkime ürünleri Fe ve HCl ile etkileştirildikten sonra nötürleştiriliyor. Ürünlerden birinin nmr spektrumu Şekil 71 de verilmiştir. Bileşiğin yapısı nasıldır? Ürün karışımındaki diğer bileşiklerin yapılarını öngörünüz.



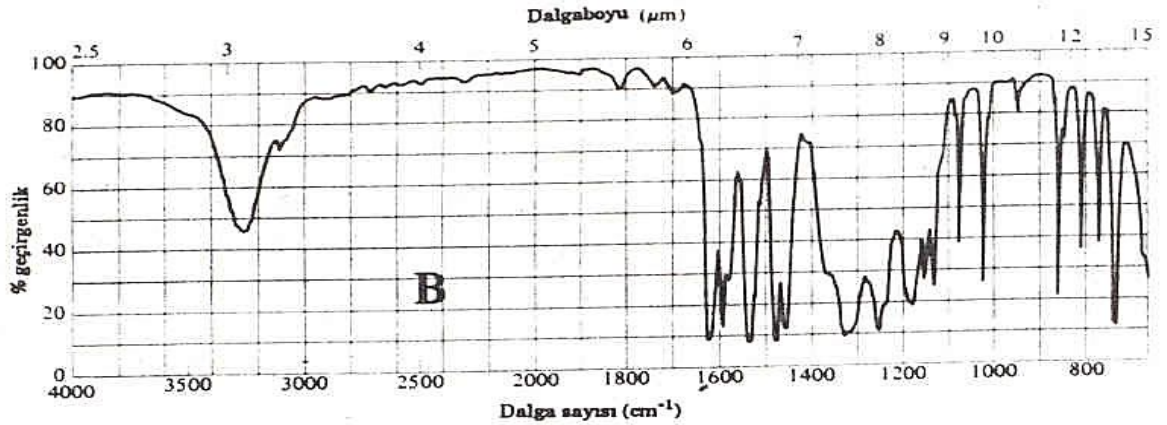
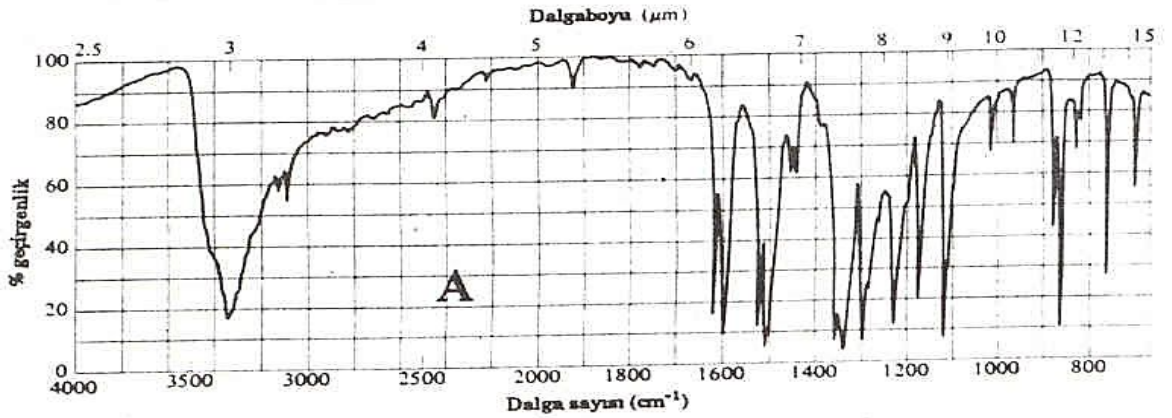
Şekil 71 Problem 34 için 1H nmr spektrumu.

38 İzomerik krezoller (metilfenoller)den biri NaOH ve iyotmetan ile etkileştiriliyor. Ürünün nmr spektrumu Şekil 72 te verilmiştir. Krezol ve ürünün yapılarını gösteriniz.

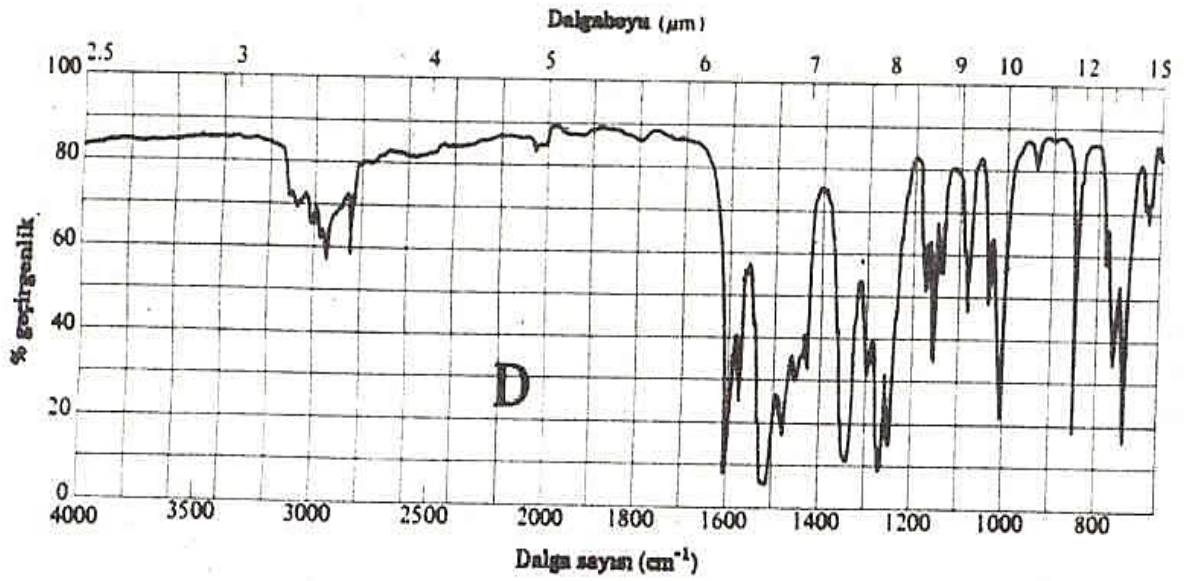
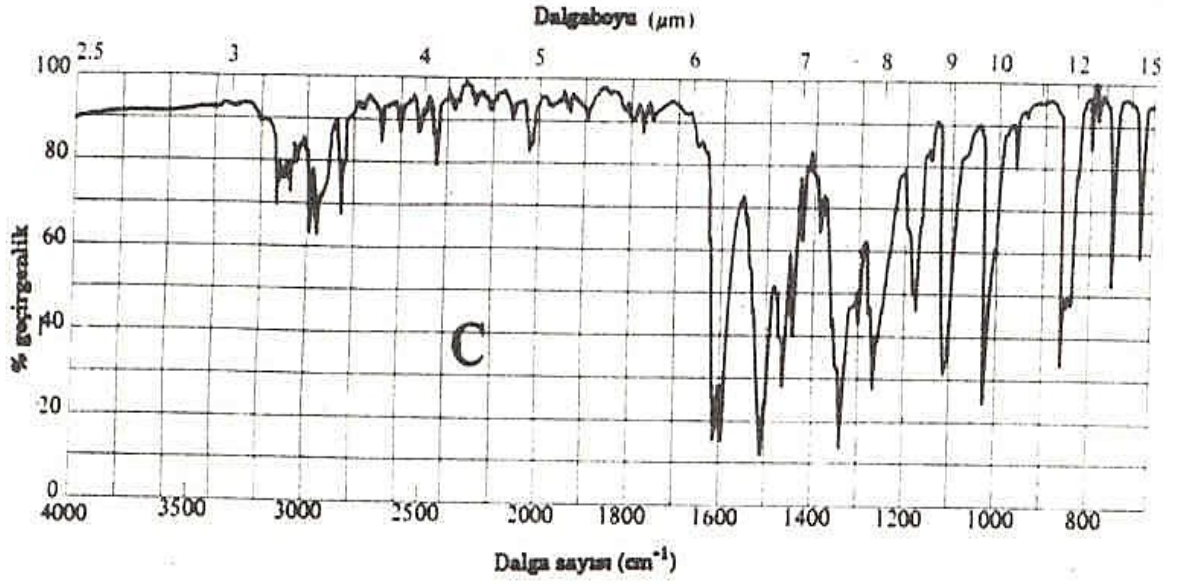


Şekil 72 Soru 38 için 1H nmr spektrumu.

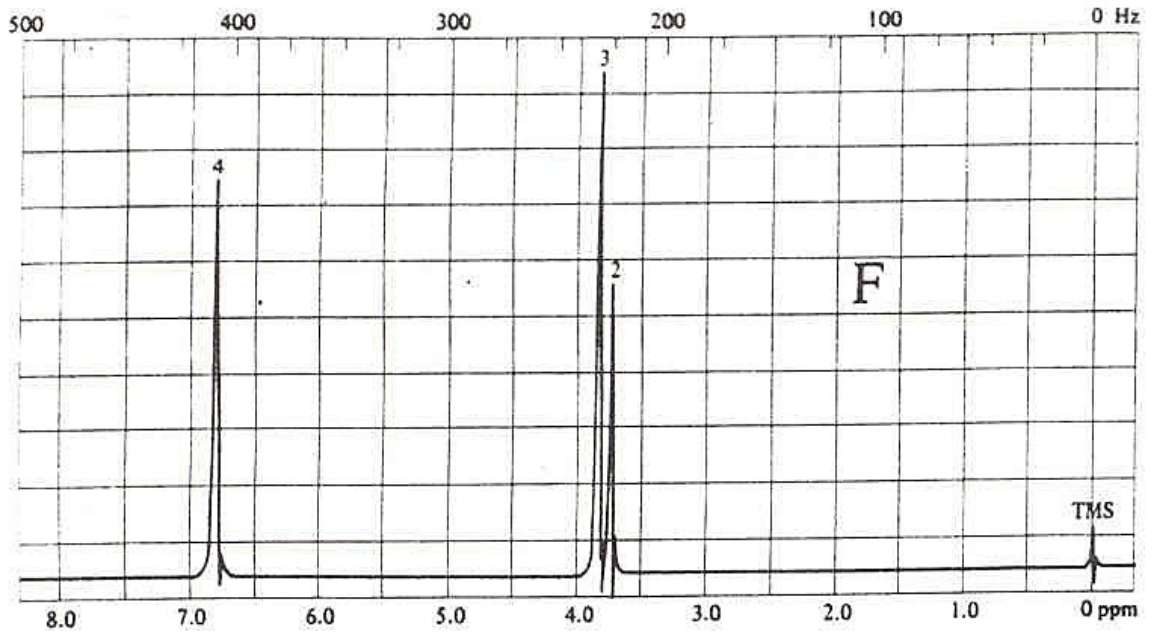
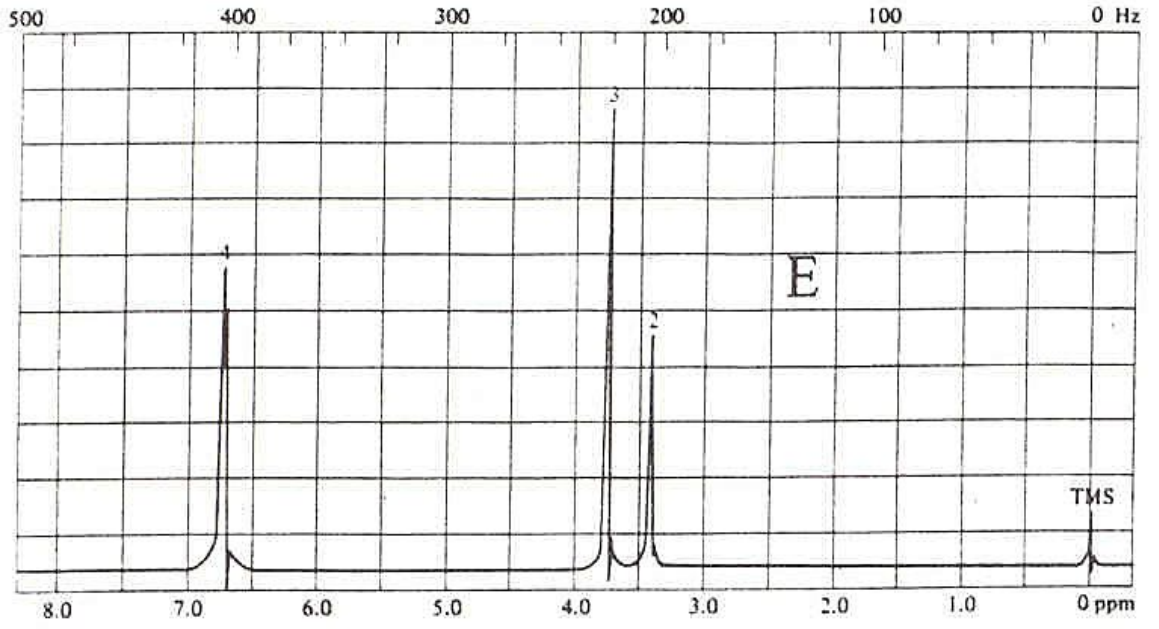
39. Bir monosübstütüe aromatik bileşğin HNO_3 ile etkileştirilmesi sonucu iki izomerik ürün oluşur. Bu ürünlere A ve B diyelim. A'nın NaOH ve sonra CH_3I ile etkileştirilmesi C'yi verir. Benzer şekilde B de D'yi vermektedir. A, B, C ve D'nin kızılötesi (IR) spektrumları Şekil 12.6 da verilmiştir. C'nin Fe ve HCl ile tepkimesi ve sonra baz eklenmesiyle E oluşur. Benzer şekilde D bileşiği F'yi verir. E ve F'nin proton nmr spektrumları Şekil 75 de verilmiştir. Bütün bu bileşiklerin yapılarını yazınız.



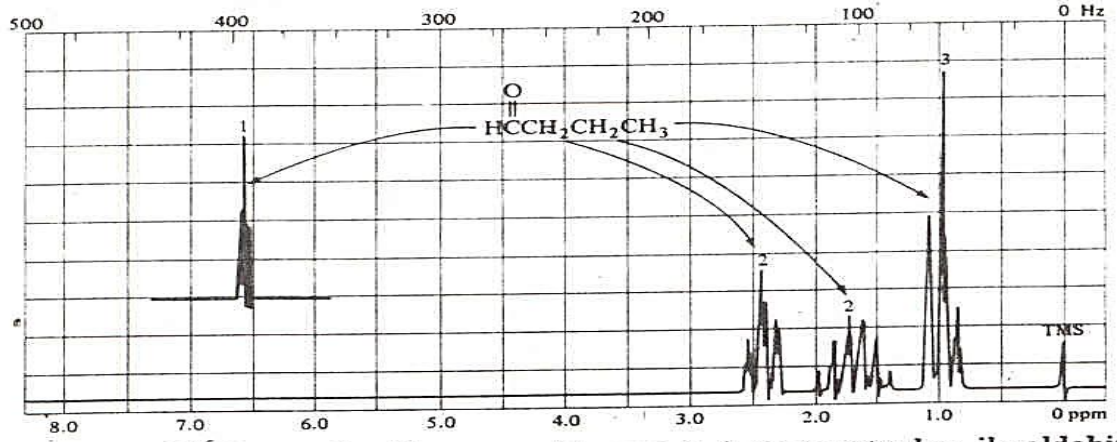
Şekil 73 Soru 39 için IR spektrumları.



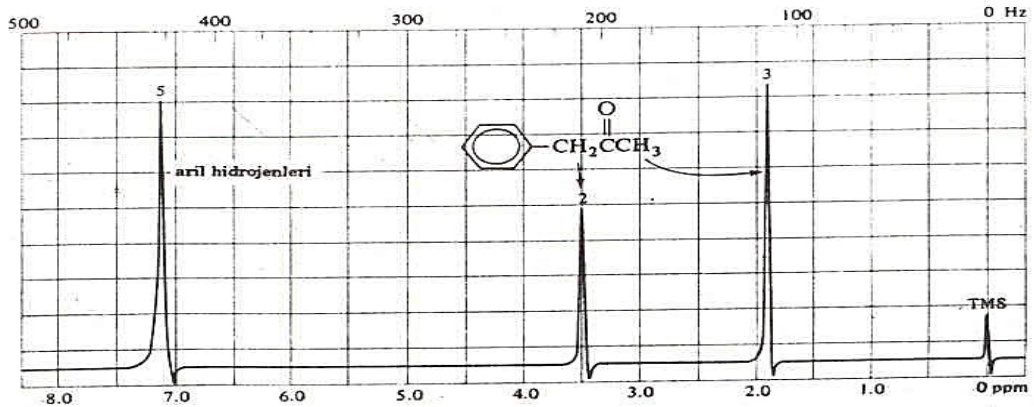
Şekil 74 Soru 39 için IR spektrumları (devamı) .



Şekil 75 Soru 39 için ¹H nmr spektrumları.



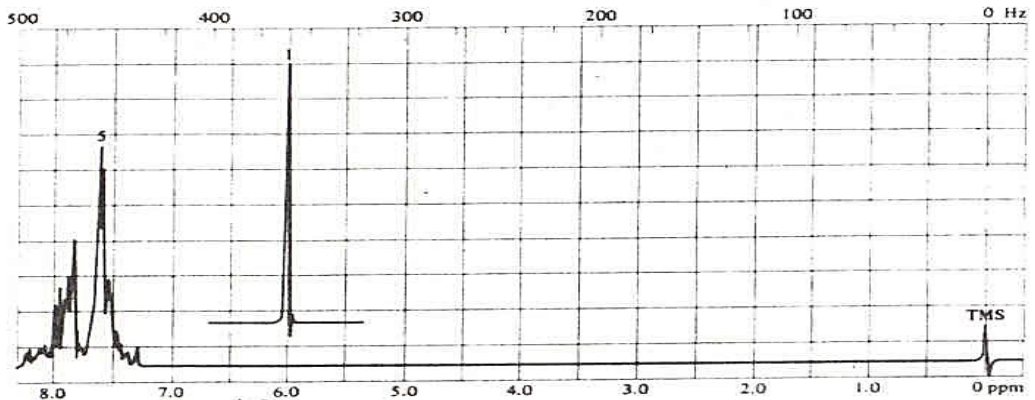
Şekil 76 Butanal'ın ^1H nmr spektrumu, α , β , ve γ protonları ile aldehit protonunun birbirlerine göre kimyasal kaymalarını göstermektedir.



Şekil 77 1-fenil-2-propanon'un ^1H nmr spektrumu.

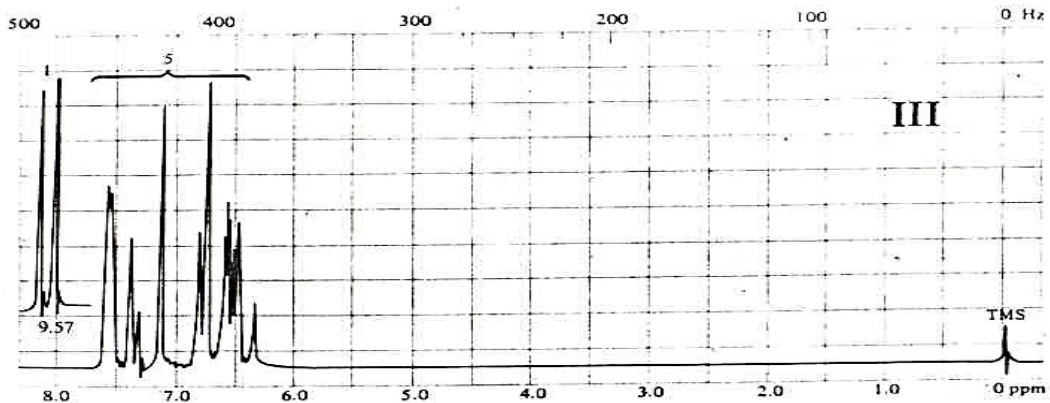
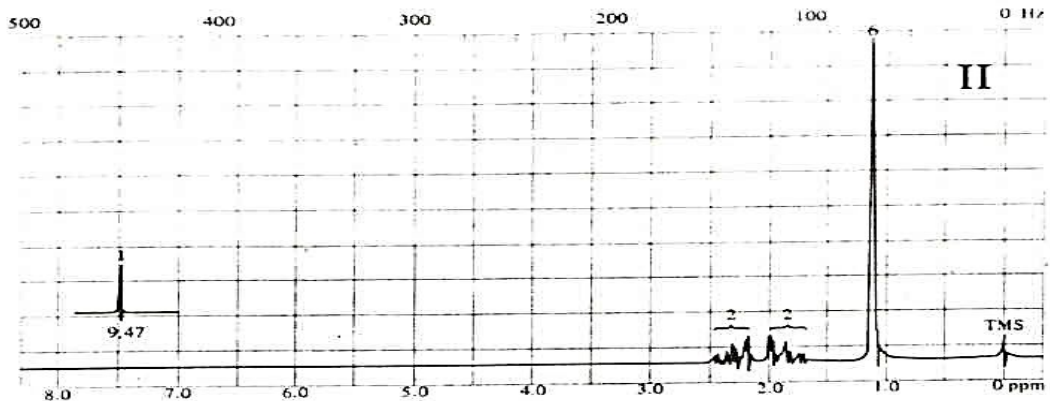
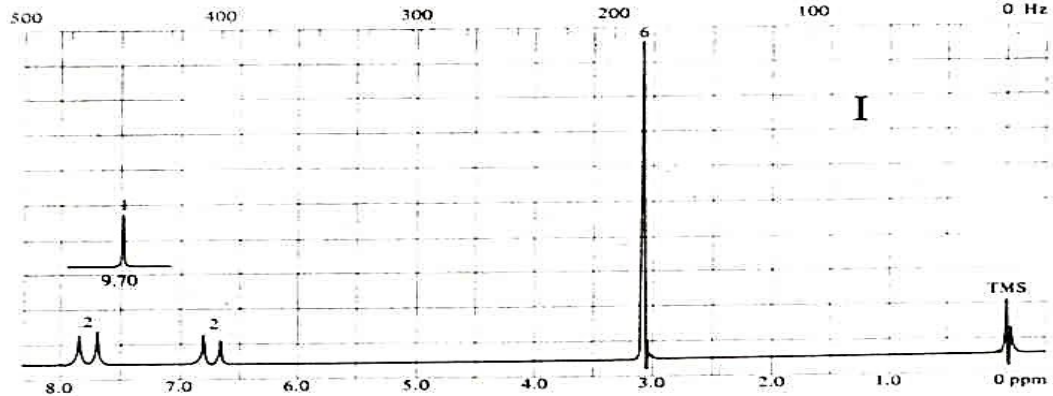
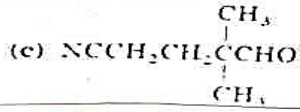
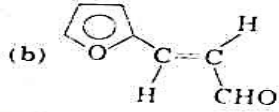
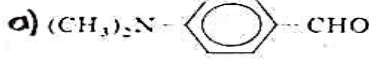
Alıştırma

4039- kapalı formülü $\text{C}_7\text{H}_6\text{O}$ olan bir bileşiğin nmr spektrumu Şekil 78 da görülmektedir. Bu bileşiğin yapısı nasıldır?



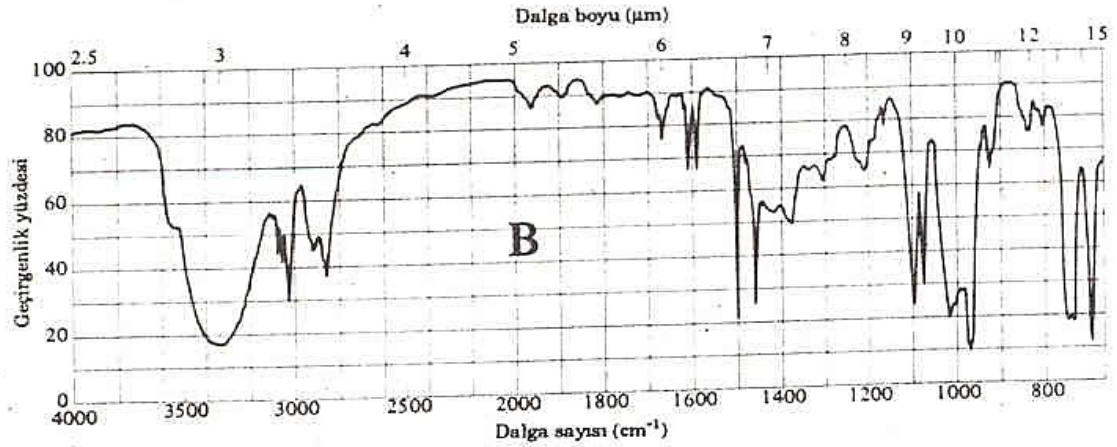
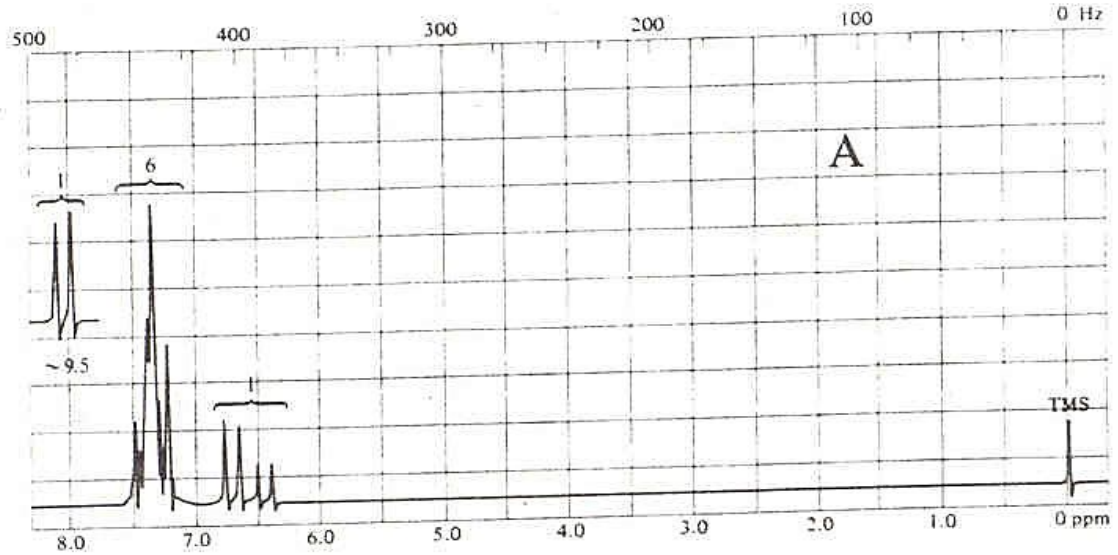
Şekil 78 Soru 39 için ^1H nmr spektrumu. (Offset soğurması 10.0 ppm. dedir.).

Şekil 79'daki spektrumların her birini, aşağıdaki yapılardan biri ile eşleştiriniz:



Şekil 79 Soru 40 için ^1H nmr spektrumları.

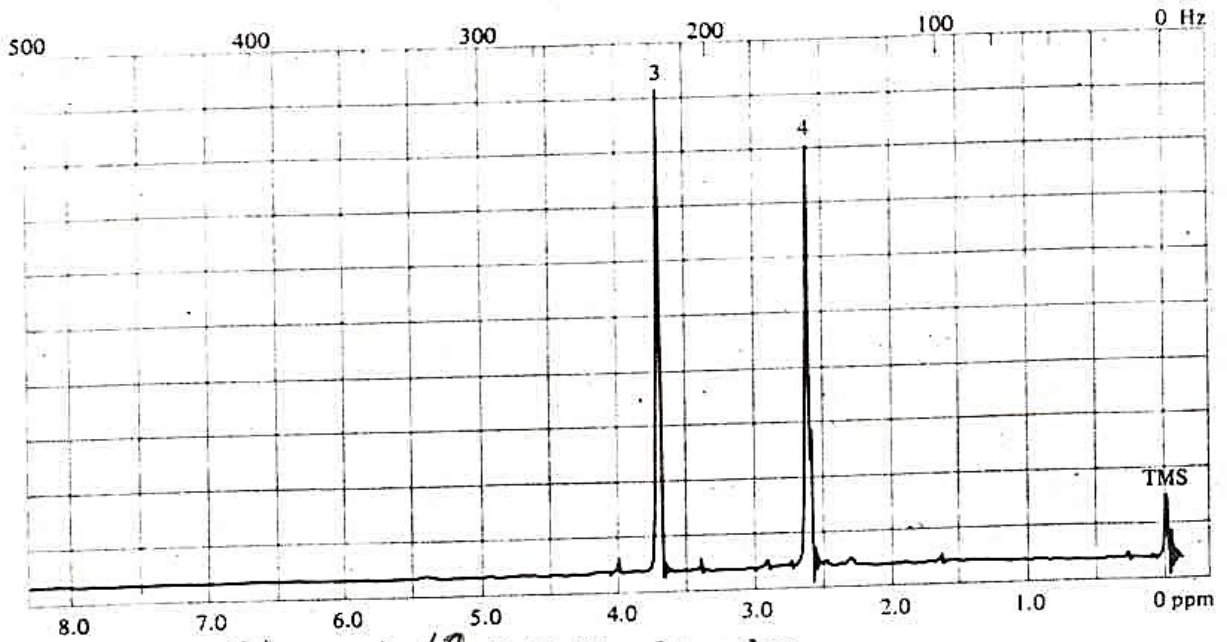
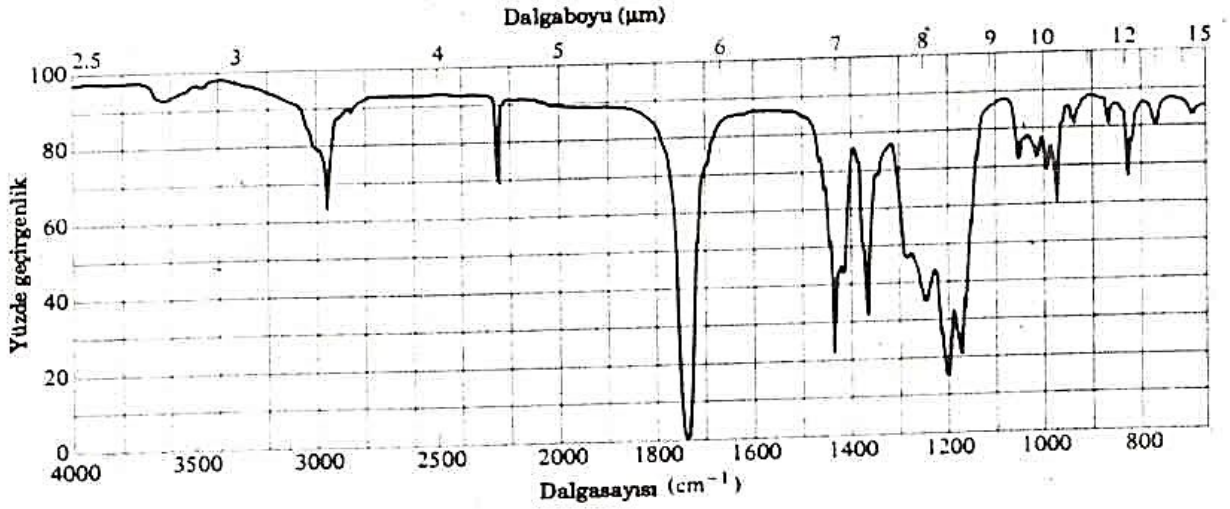
92 Bileşik A'nın moleköl ağırlığı 132'dir. Bileşik A, sulu metanol içinde NaBH_4 ile muamele edildiğinde, Bileşik B elde edilmektedir. Bileşik A'nın proton nmr spektrumu ve bileşik B'nin IR spektrumu şekil 80'de görölmektedir. Bileşik A ve B'nin yapıları nedir?



Şekil 80 Soru 92 için spektrumlar

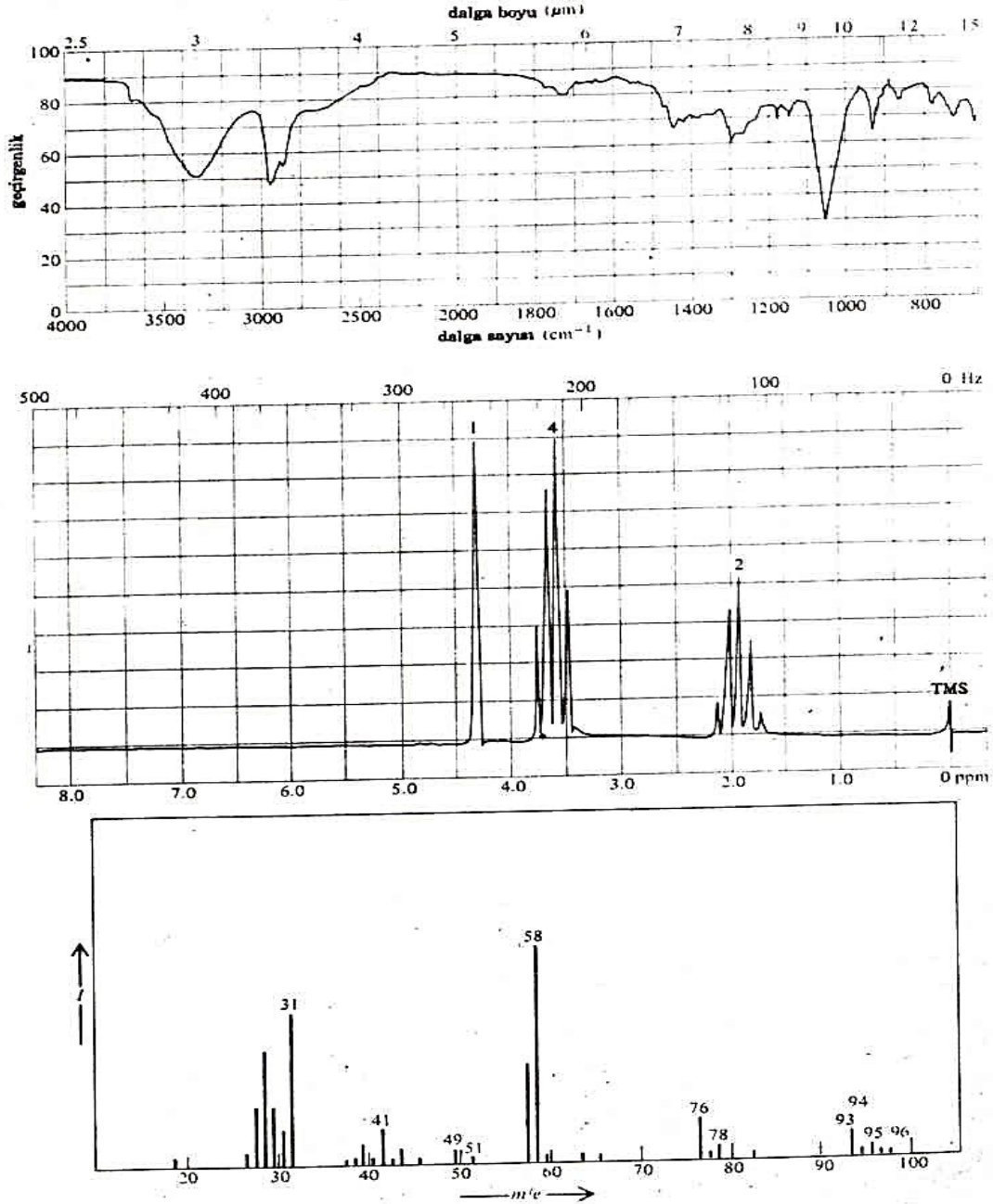
Alıştırma

43 Bilinmeyen bir bileşiğin molekül formülü $C_5H_7O_2N$ dir. 1H nmr ve IR spektrumları Şekil 81 de görülen bu bileşiğin yapısal formülünü bulunuz.

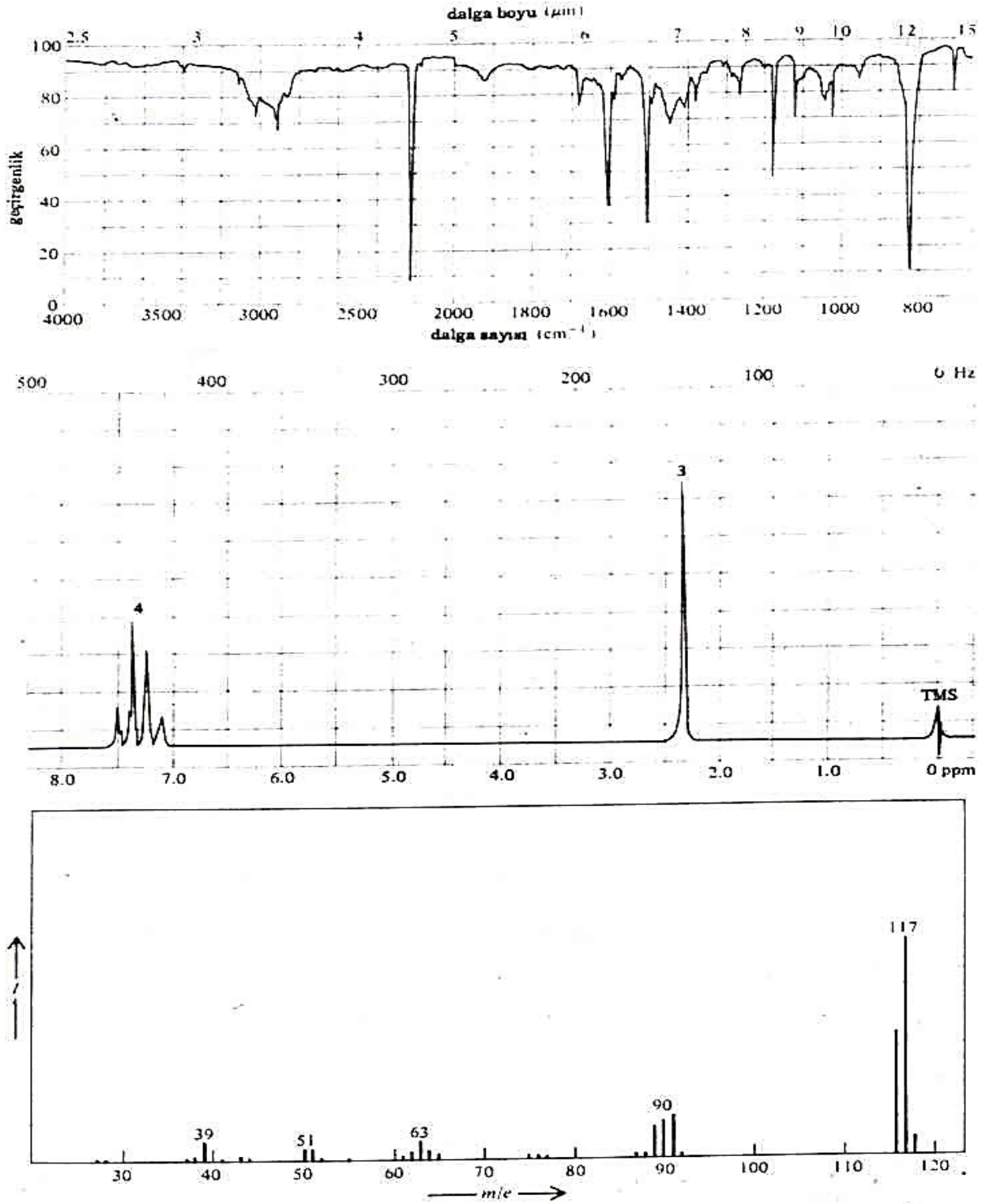


Şekil 81 Alıştırma 43 ile ilgili spektrumlar

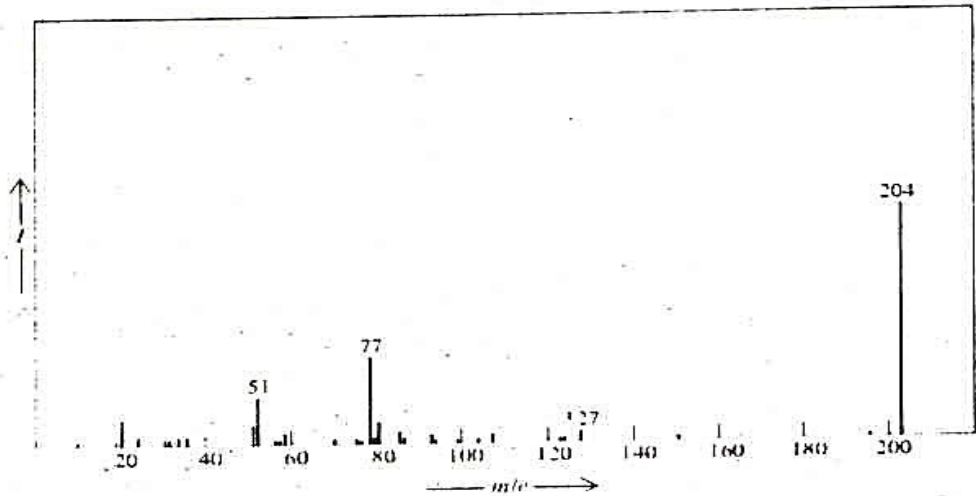
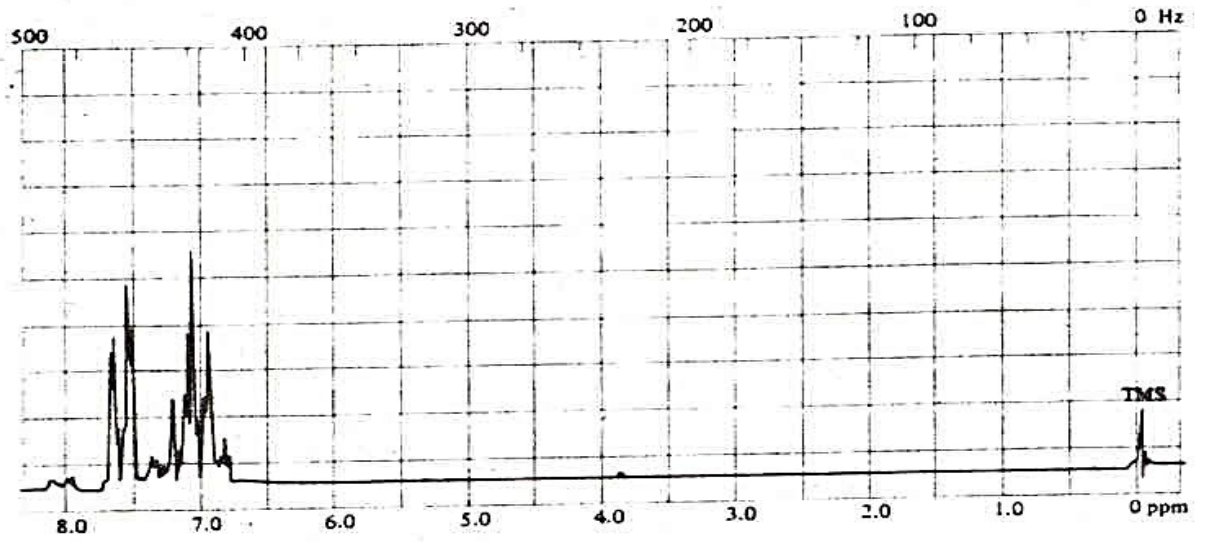
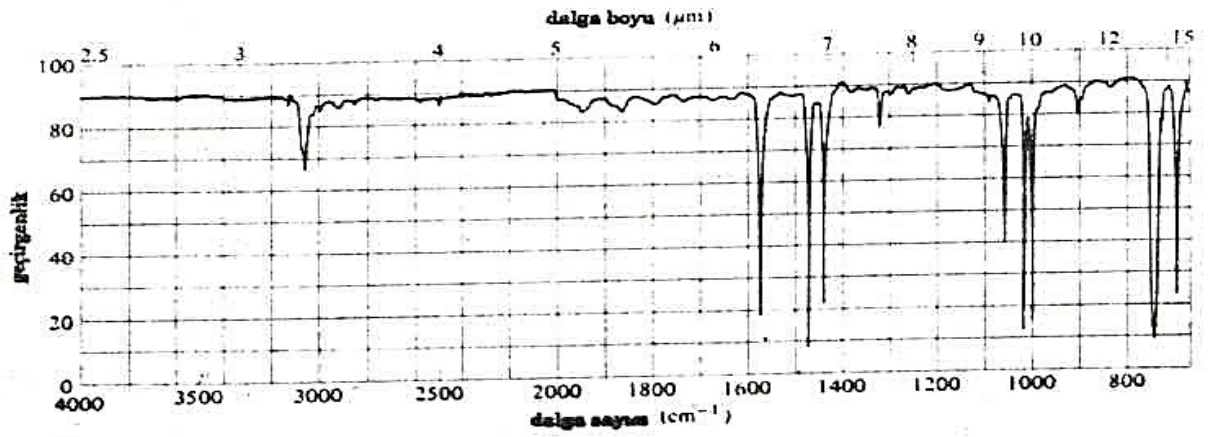
48 A dan C ye kadar olan bileşiklerin kızılötesi, ^1H nmr ve kütle spektrumları Şekil 82 den 84 a kadar verilmiştir. Bu spektrumlardan yararlanarak herbir bileşiğin yapısını belirleyiniz.



Şekil 82 Problem 48 deki A bileşiği için spektrumlar.
dalga boyu



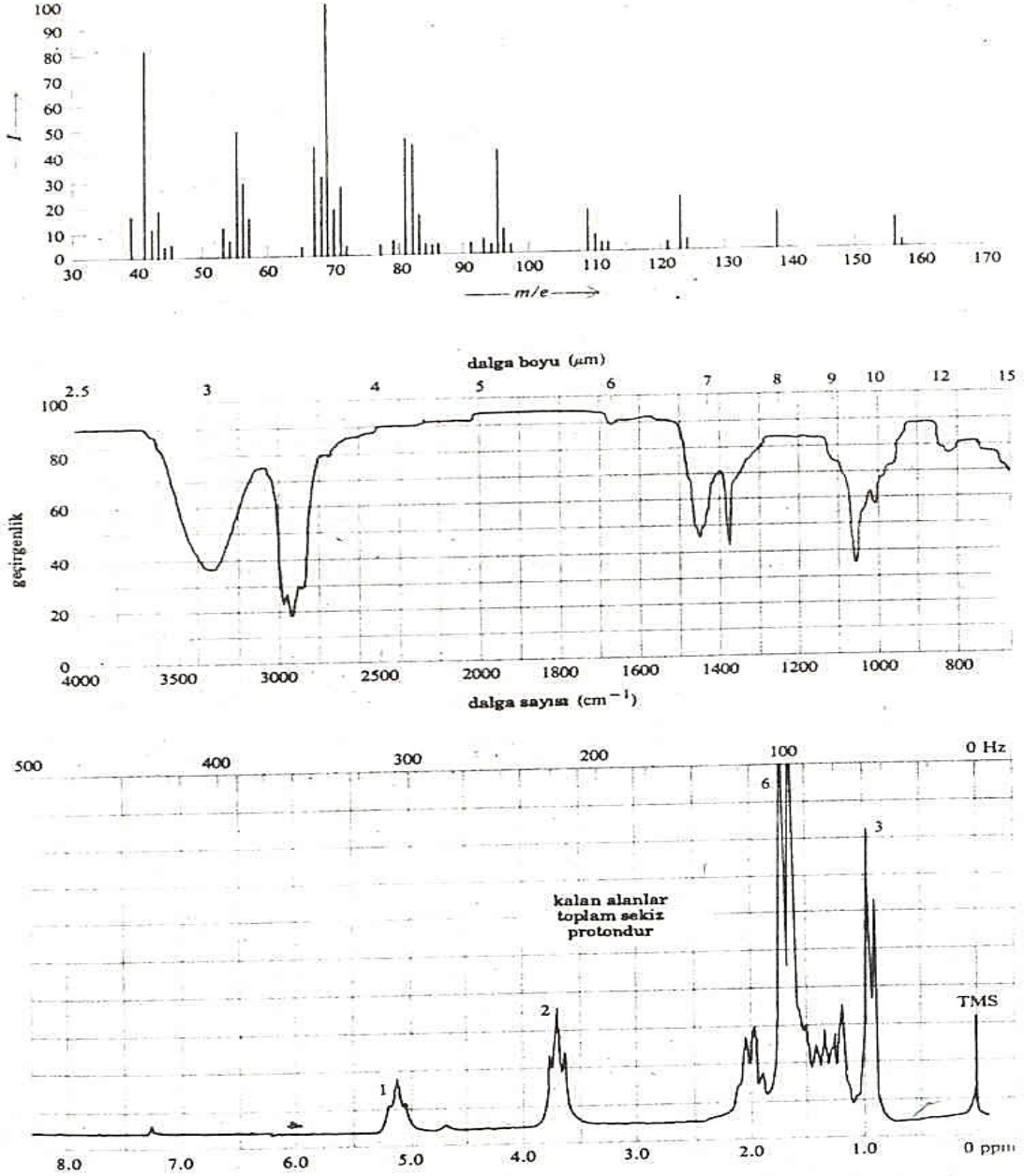
Şekil 83 Problem 43 deki B bileşiği için spektrumlar.



Şekil 85 Problem 481'deki C bileşiği için spektrumlar.

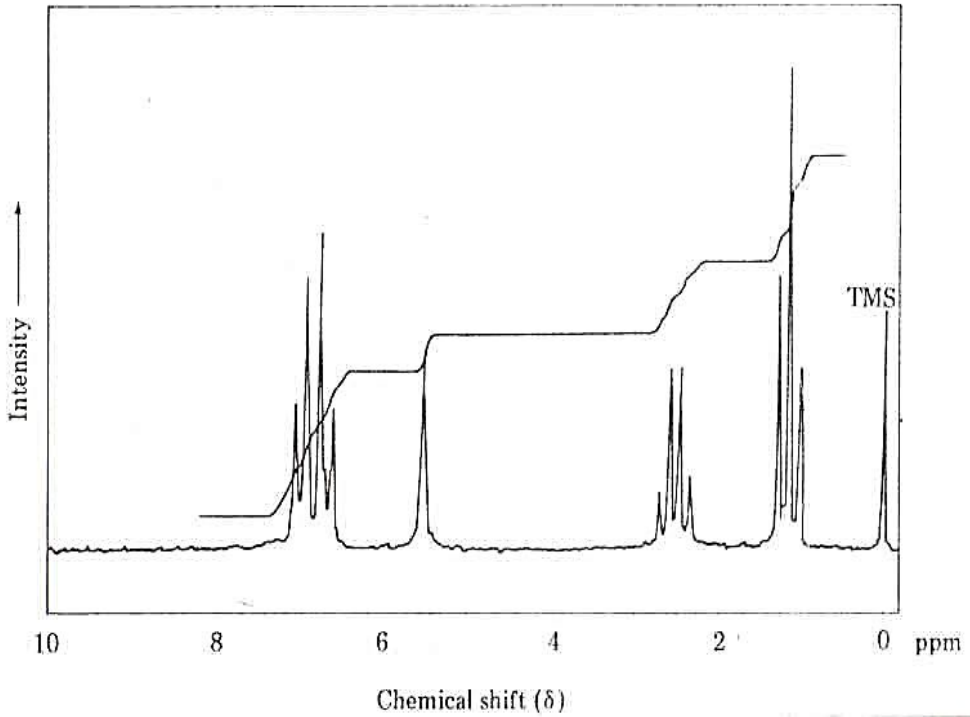
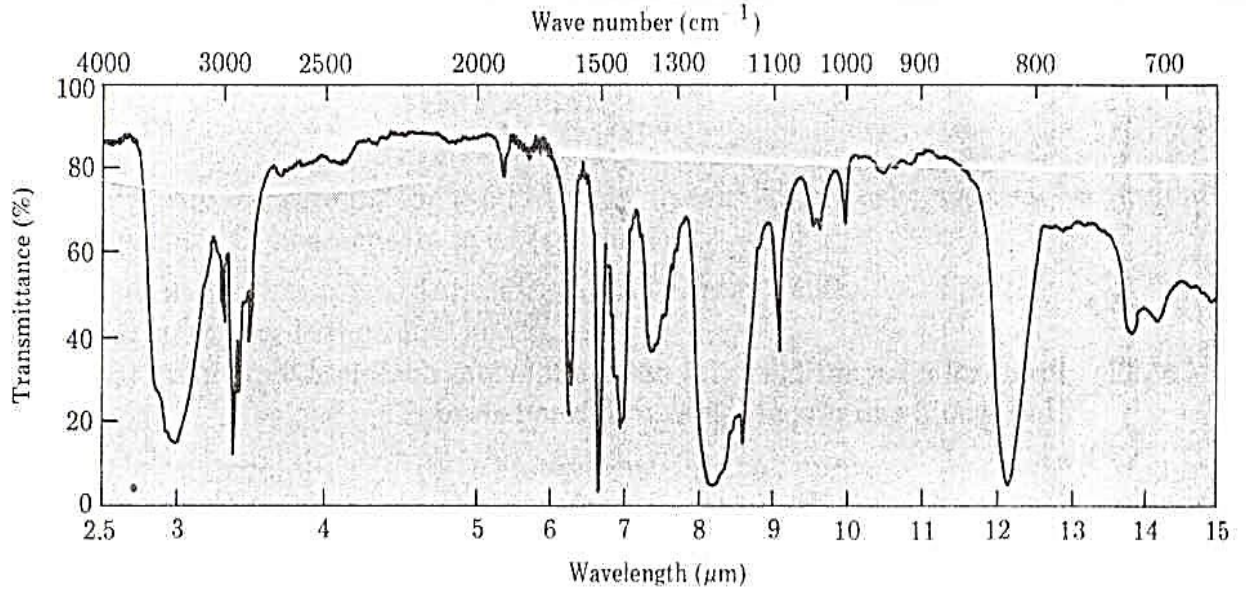
150

Bileşik A bir kiral karbonu olan terpenoidtir. Bu bileşiğin (S)- enantiomeri gül-yağı ve ıtır-yağının ana bileşenidir. Bileşik A'nın spektrumları Şekil 85'de verilmiştir. Bileşiğin (S)-enantiomerinin yapısı nasıldır? (Uyarı: Bileşik A'nın terpenoid olmasının önemi nedir?).

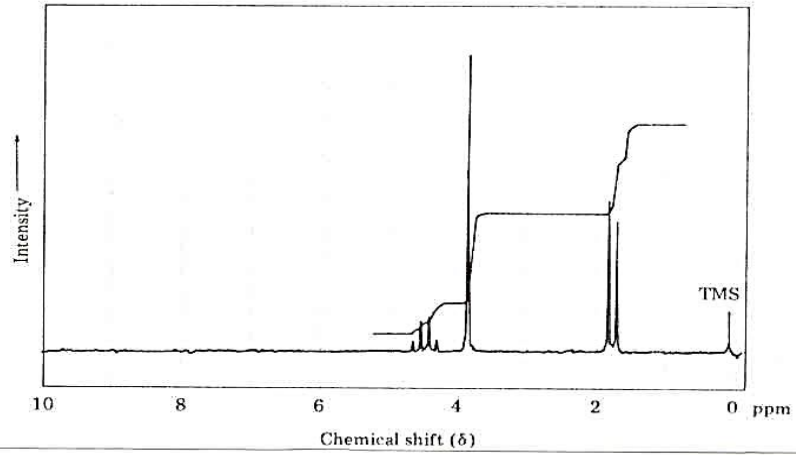
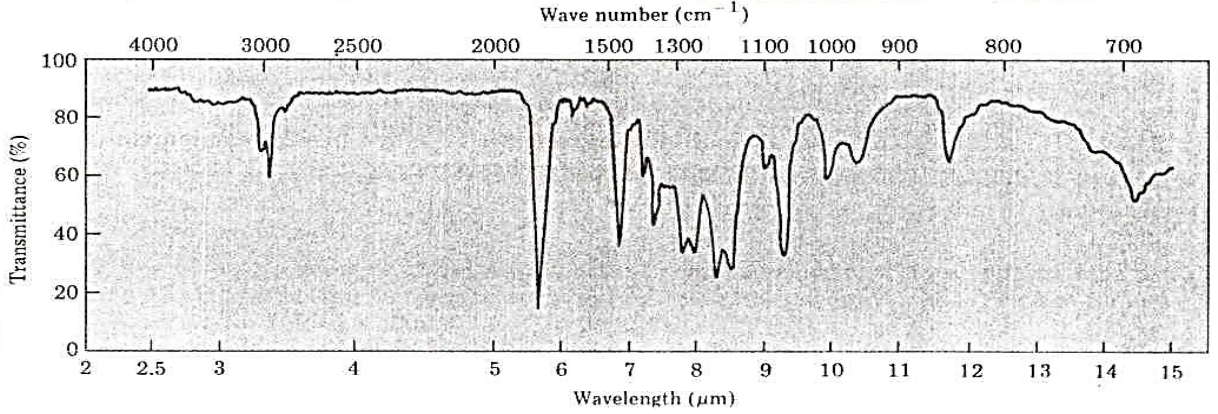


Şekil 85. Problem 48'deki A bileşiği için spektrumlar.

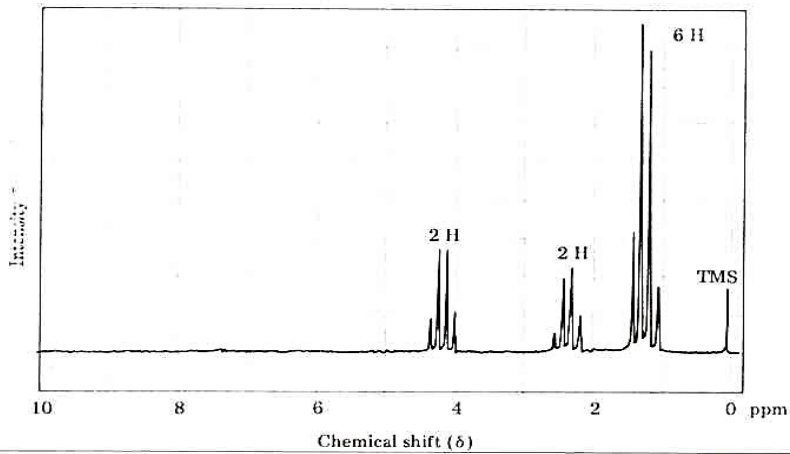
Alıştırma 46 Aşağıda $C_8H_{10}O$ maddesinin IR ve 1H nmr spektrumuna göre yorumlayınız?



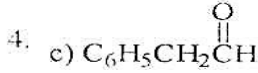
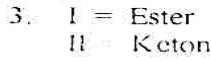
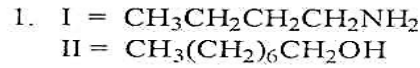
Alıştırma 47- Aşağıda $C_4H_7ClO_2$ maddesinin IR ve 1H nmr spektrumuna göre yorumlayınız?



Alıştırma 48- Aşağıdaki $C_5H_{10}O_2$ maddesinin 1H nmr spektrumunu yorumlayınız?

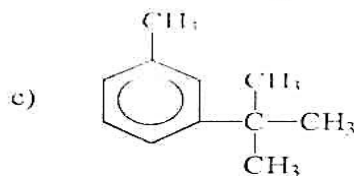
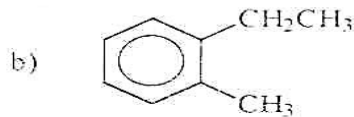
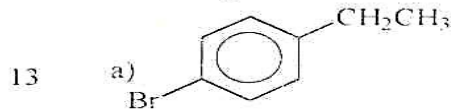
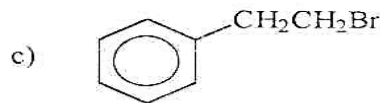
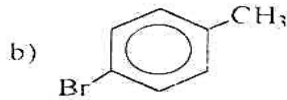
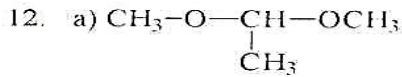
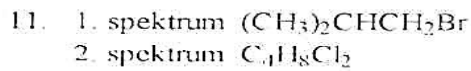
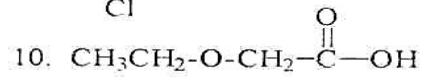
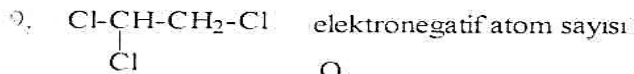
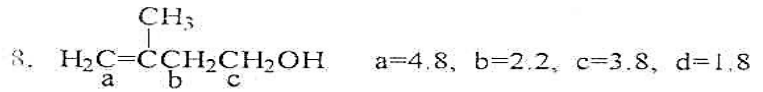
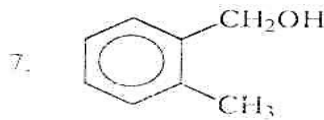


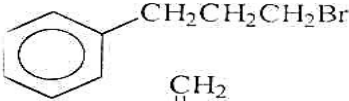
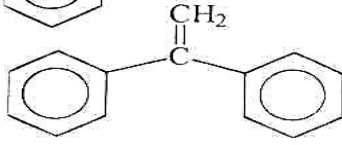
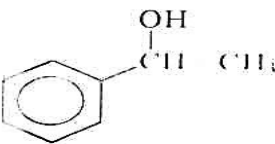
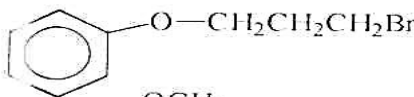
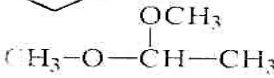
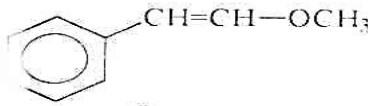
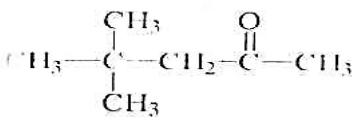
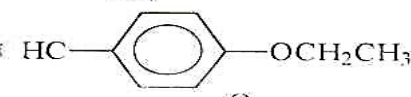
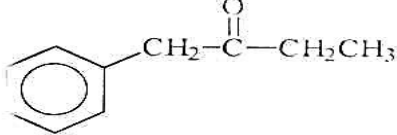
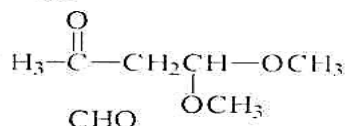
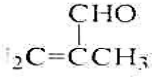
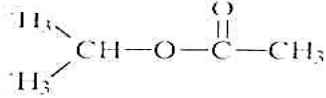
Alıştırımların Cevapları

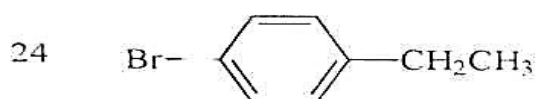
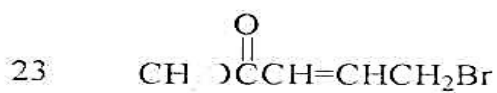
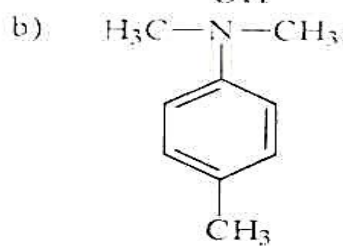
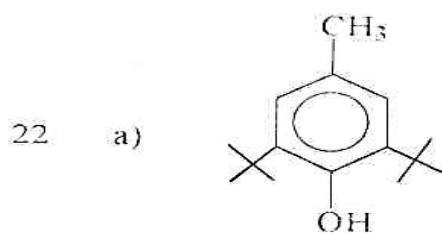
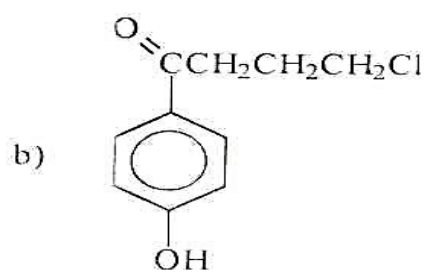
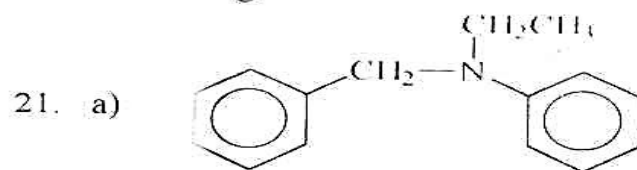
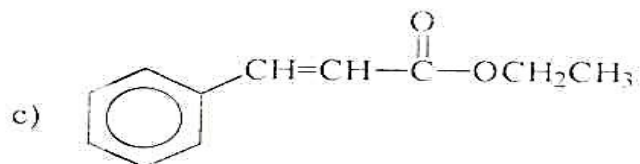
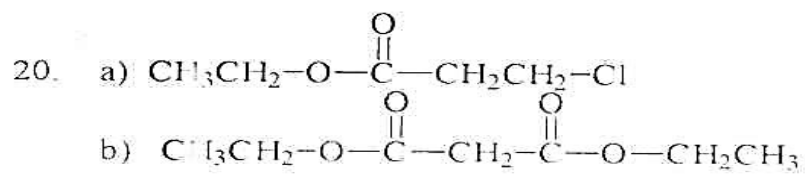


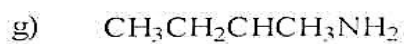
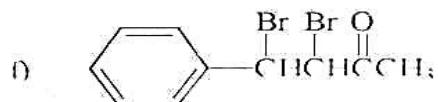
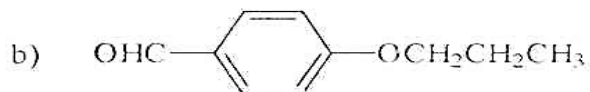
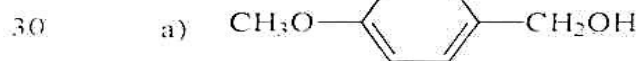
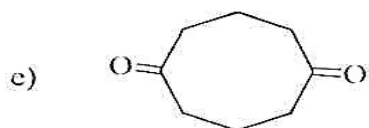
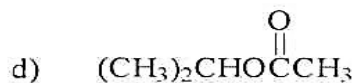
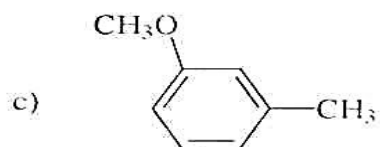
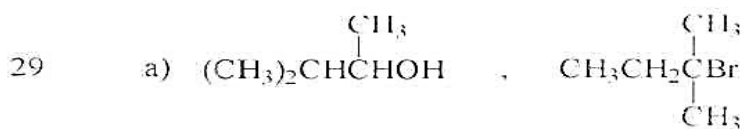
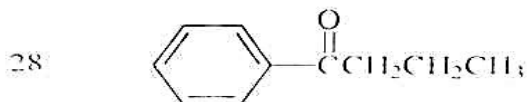
5. c, d, e

6. bir pik



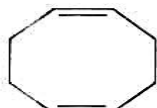
14. a) 
 b) 
15. a) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
 b) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHOHCH}_2\text{CH}_3$
- c) 
16. a) 
 b) 
 c) 
17. a) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$
 b) 
 c) 
18. a) 
 b) 
 c) 
19. a) $\text{H}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}(=\text{O})\text{Cl}$
 b) 
 c) 



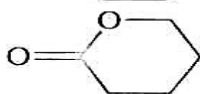


31

a)



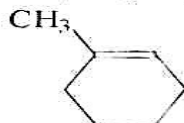
b)

c) $(\text{CH}_3\text{C})_2\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{OCH}_3)_2$

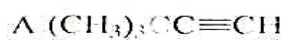
32



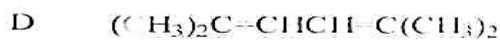
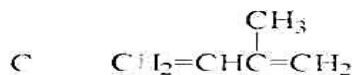
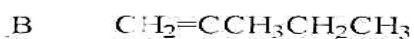
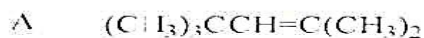
33



34



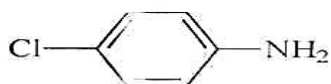
35



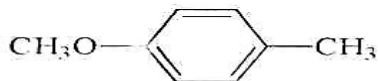
36



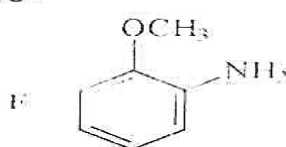
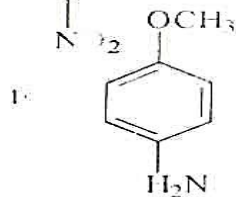
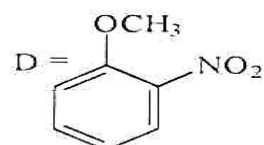
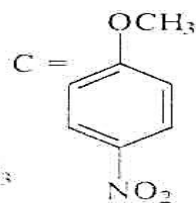
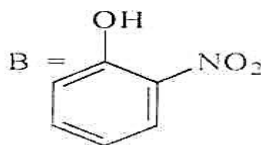
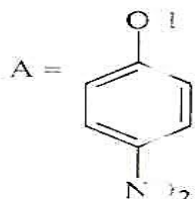
37



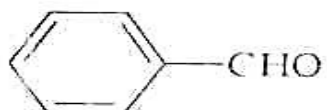
38



39



40

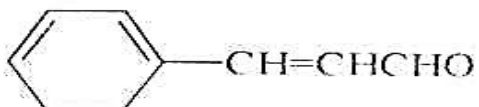


41

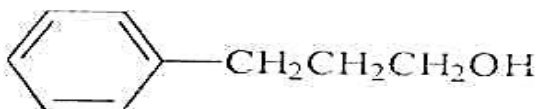
I = a, II = c, III = b

42

A



B

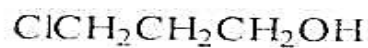


43



44

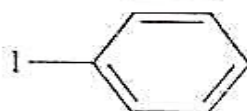
A



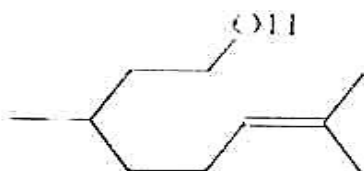
B



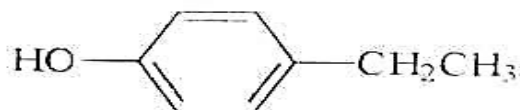
C



45



46



47



48



KAYNAKLAR

1. John McMurry, "Organic Chemistry", Second Edition, Brooks / Cole Publishing Company, California, USA-1984
2. Ralph J. Fessenden, Joan S. Fessenden, "Organik Kimya" Çeviri Editörü : Tahsin Uyar, Güneş Kitabevi Ltd. Şti. Ankara-1990.