

IR I NMR SPEKTROSKOPIJA

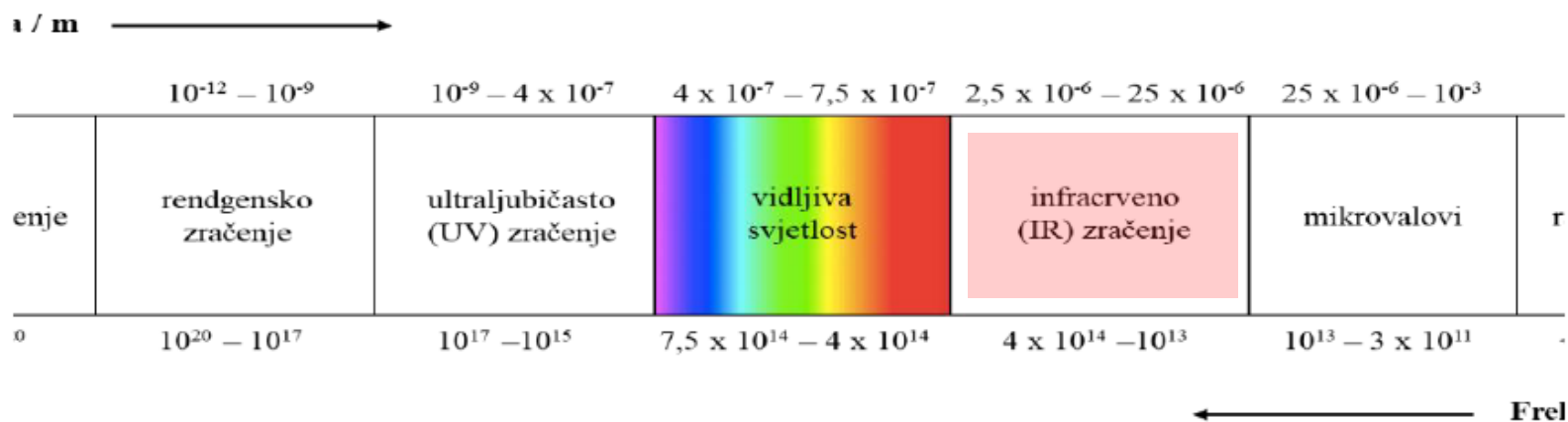
Osnovni praktikum organske kemije

2025./2026.

dr. sc. Barbara Panić
bpanic@chem.pmf.hr

INFRACRVENA SPEKTROSKOPIJA (IR)

Spektar elektromagnetskog zračenja



Strukturna analiza organskih molekula:

- IR zračenje valnih duljina između $2,5 \times 10^{-6}$ m i 25×10^{-6} m
- valni brojevi $\tilde{\nu} = 4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$
- Identifikacija odgovarajućih funkcijskih skupina prisutnih u molekuli

IR zračenje pobuđuje vibracije istezanja i savijanja veza u molekul



Vibracije istezanja i savijanja veza

Frekvencija vibracije veze ovisi o masama atoma i jakosti veze prema izrazu:

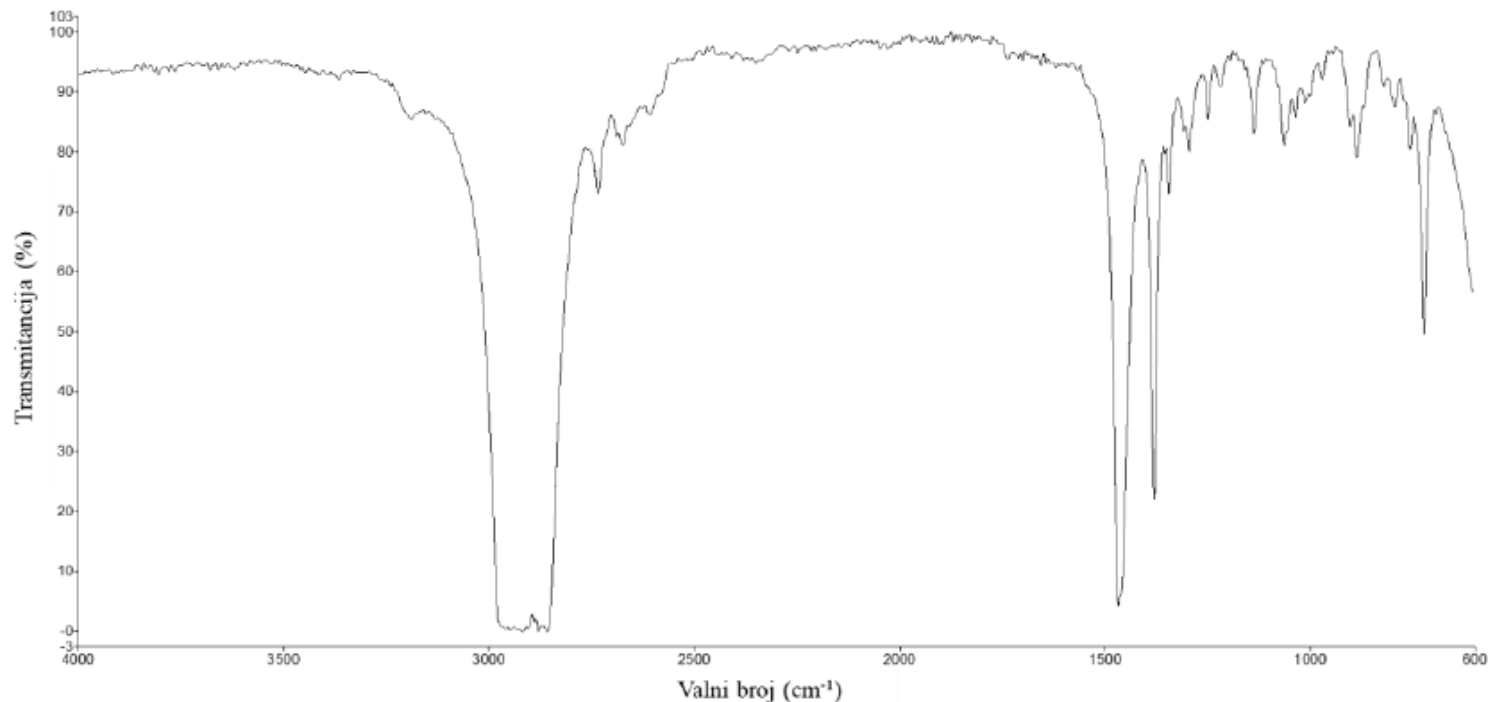
$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

ν – frekvencija vibracije veze

k – konstanta sile (jakost veze)

μ – reducirana masa ($\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$)

Prema gornjem izrazu, teži atomi vibriraju sporije (pri nižim frekvencijama) od lakših, a jače veze vibriraju brže (pri višim frekvencijama) od slabijih.



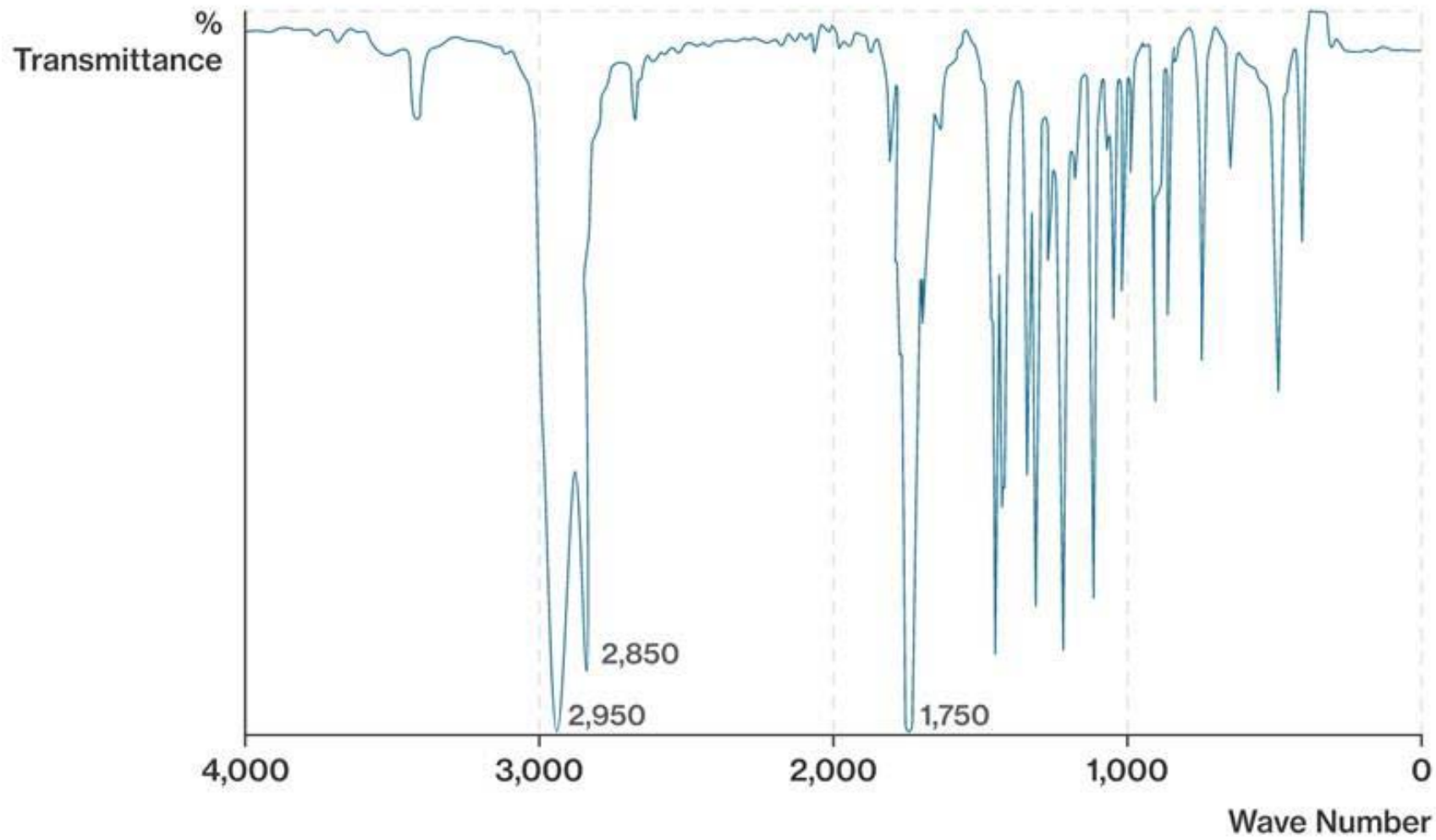
IR spektar heksana

- IR spektar prikazuje ovisnost apsorbancije ili transmitancije o valnom broju ili valnoj duljini.
- Signali koji se javljaju u IR spektrima nazivaju se vrpcoma.
- Da bi molekularna vibracija bila IR aktivna, vibracija mora uzrokovati promjenu dipolnog momenta molekule.
- Što je veća promjena dipolnog momenta, jači je intenzitet vrpce u IR spektru.

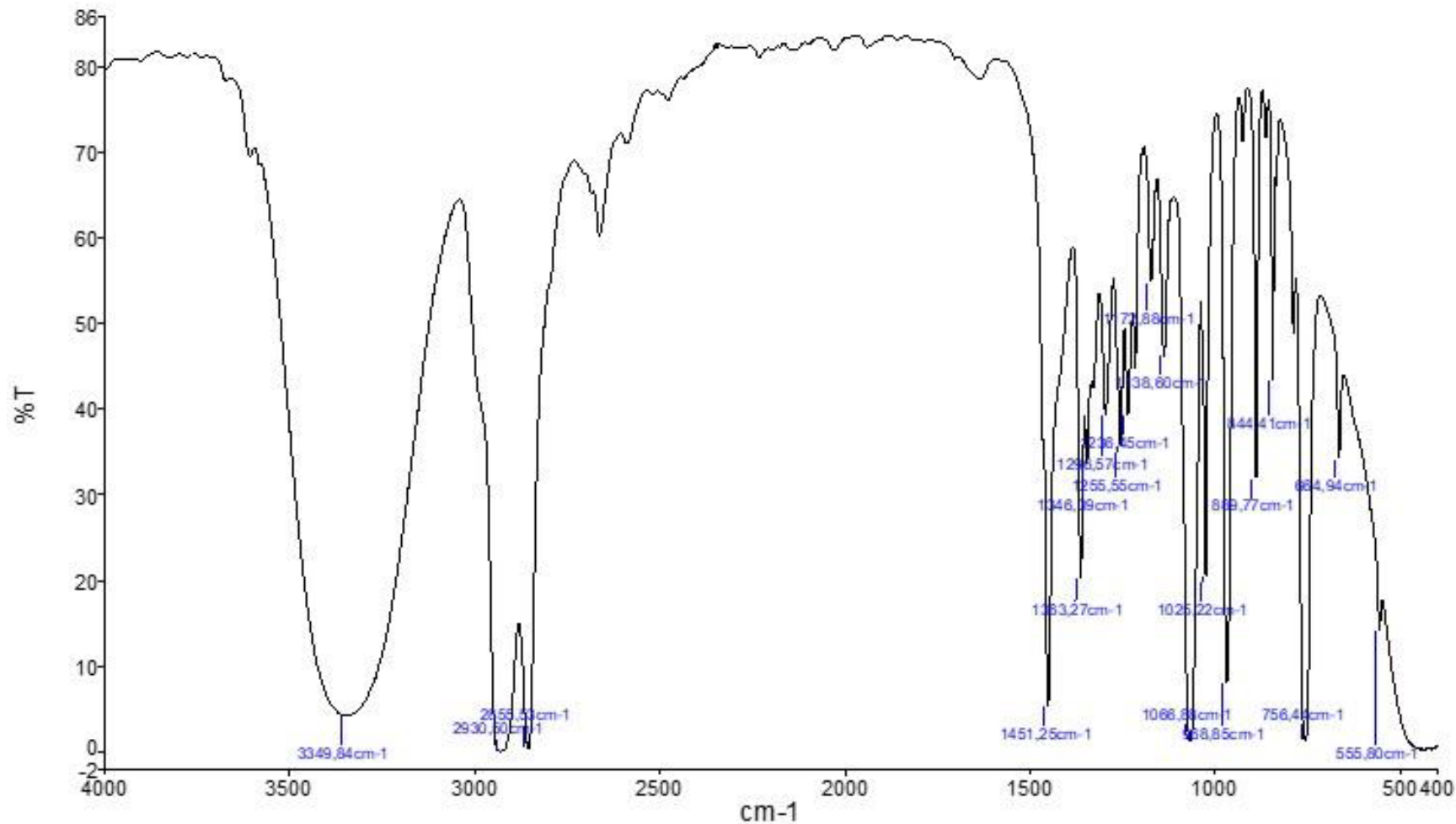
Zadatak:

1. a) Napišite potrebne reakcijske uvjete za pretvorbu cikloheksanona u cikloheksanol.
- b) Asignirajte IR spektre cikloheksanona i cikloheksanola.
- c) Objasnite kako biste pomoću IR spektroskopije potvrdili da je redukcija cikloheksanona u cikloheksanol bila uspješna.

Cikloheksanon



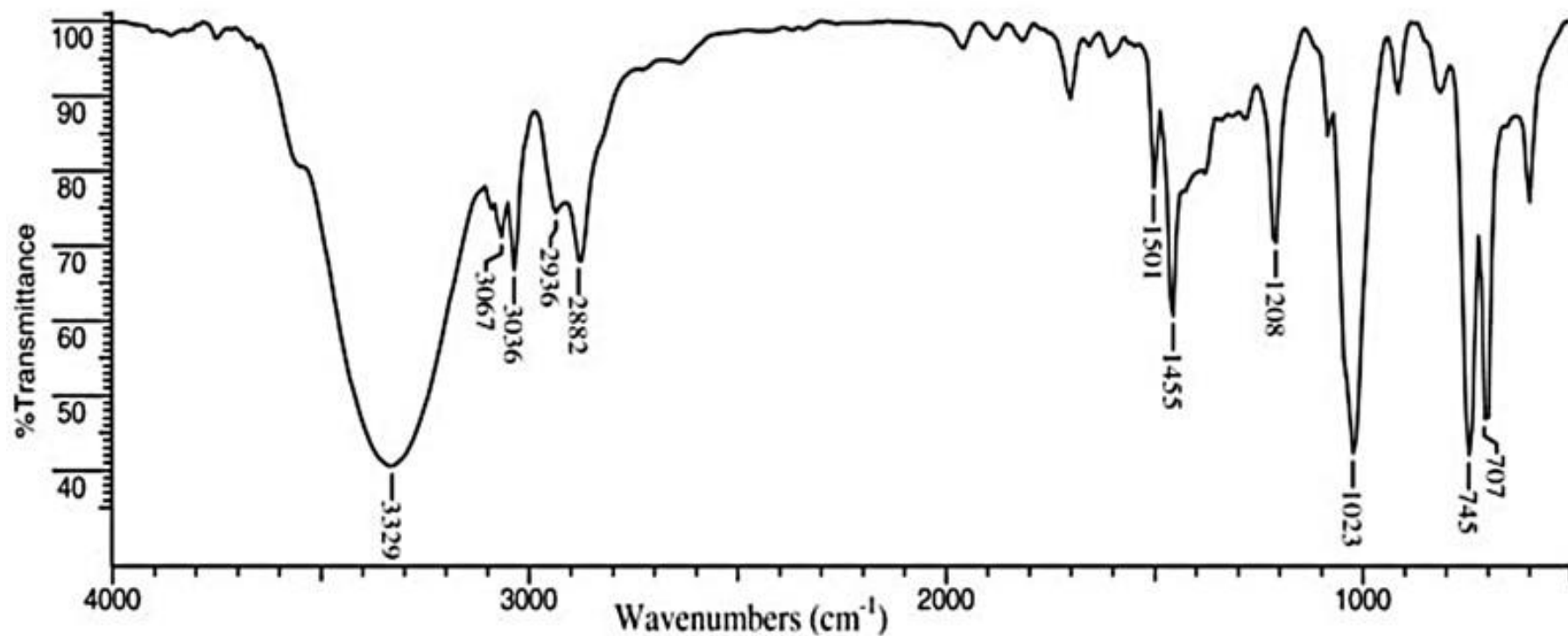
Cikloheksanol



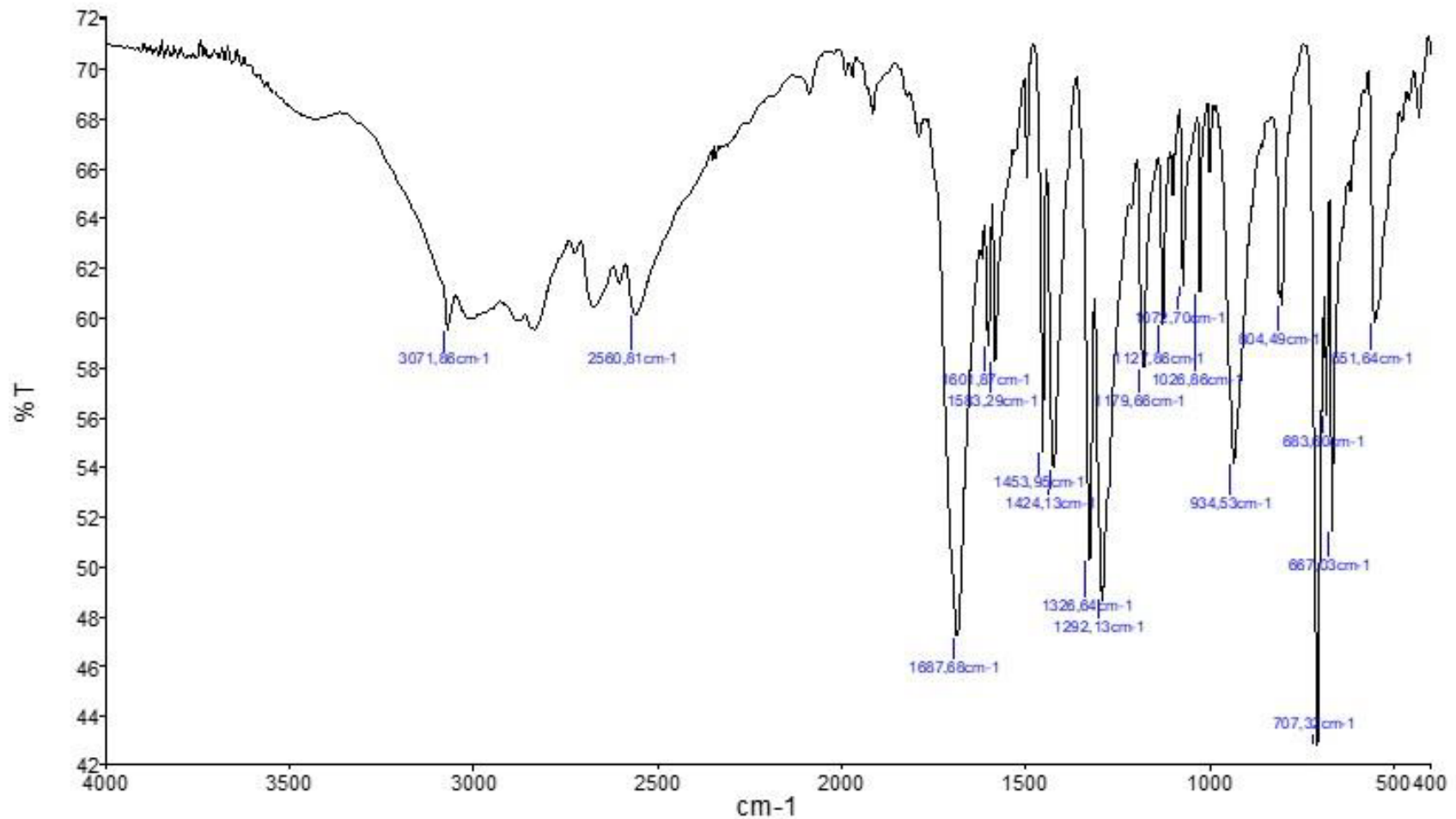
Zadatak:

2. a) Napišite potrebne reakcijske uvjete za pretvorbu benzilnog alkohola u benzojevu kiselinu.
- b) Asignirajte IR spektre benzilnog alkohola i benzojeve kiseline.
- c) Objasnite kako biste pomoću IR spektroskopije potvrdili da je oksidacija benzilnog alkohola u benzojevu kiselinu bila uspješna.

Benzilni alkohol



Benzojeva kiselina



SPEKTROSKOPIJA NUKLEARNE MAGNETSKE REZONANCIJE (NMR)



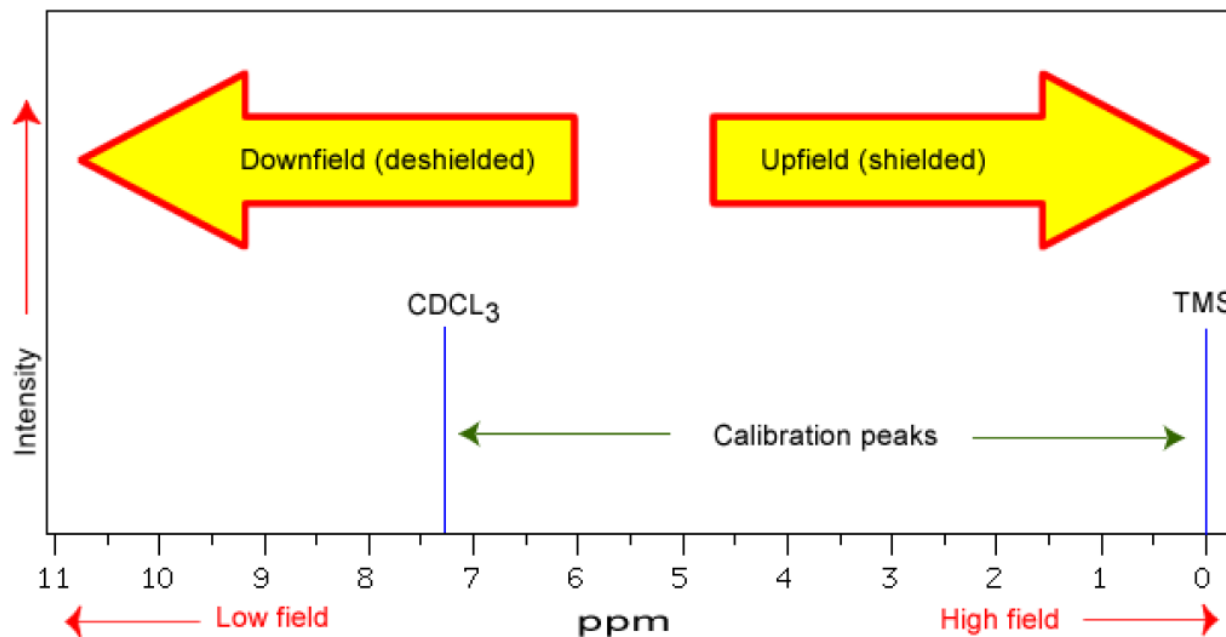
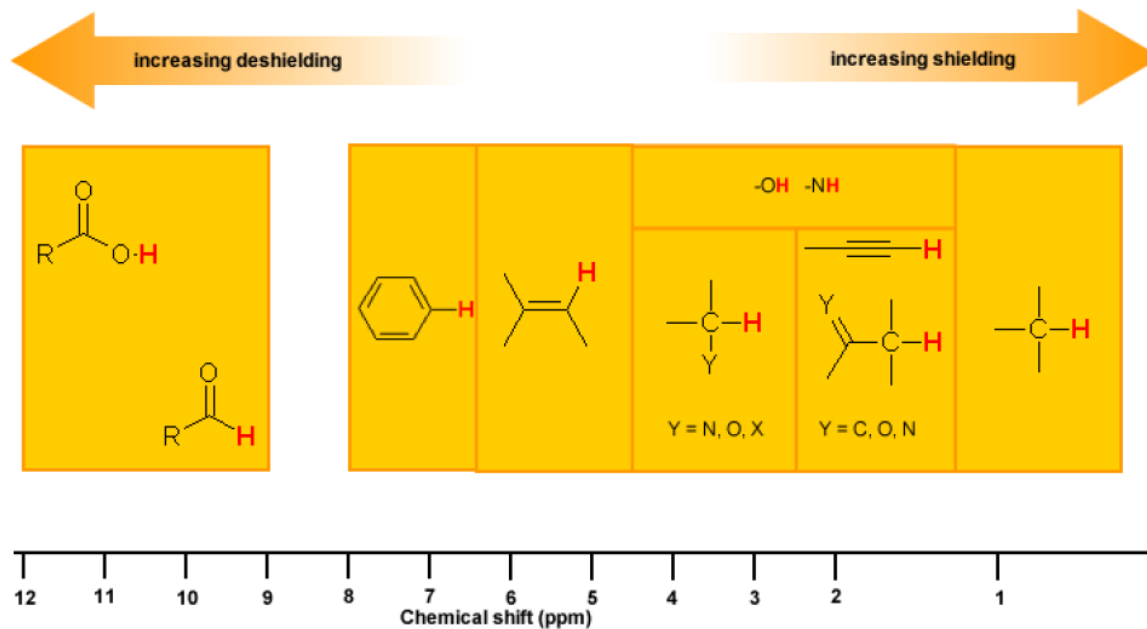
^1H i ^{13}C NMR spektri daju informacije o broju atoma vodika i ugljika u molekuli i načinu na koji su ti atomi međusobno povezani, a također omogućuju identifikaciju prisutnih funkcijskih skupina.

Kemijski pomak:

- položaj pojedine jezgre u spektru NMR
- ne mjeri se kao apsolutna vrijednost nego je definiran prema signalu nekog referentnog spoja (tetrametilsilan, $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$ (TMS))

$$\delta(\text{ppm}) = \frac{\nu - \nu_{\text{ref}}}{\nu_0} \times 10^6$$

- nije ovisan o jakosti magnetskog polja i frekvenciji spektrometra
- na vrijednosti kemijskih pomaka jezgara utječu različiti čimbenici npr. elektronegativni supstituenti i π veze
- elektronegativni atomi odvlače el. gustoću (odsjenjuju jezgru) te povećavaju kemijski pomak promatrane jezgre



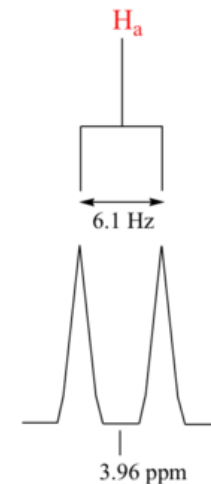
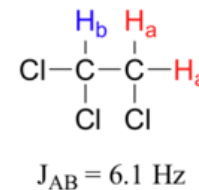
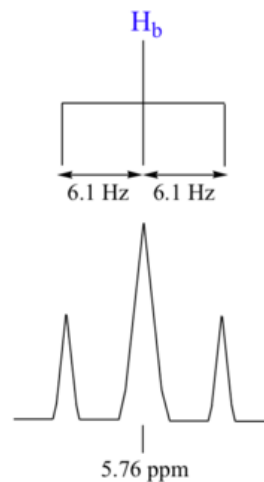
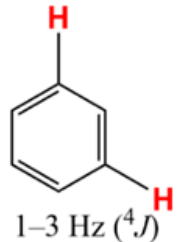
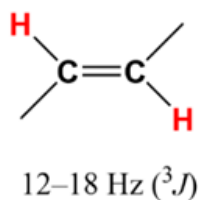
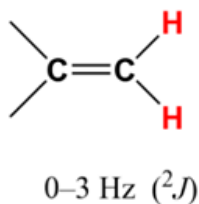
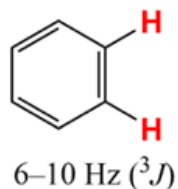
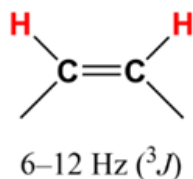
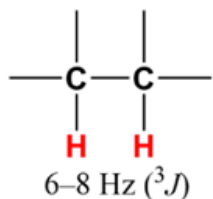
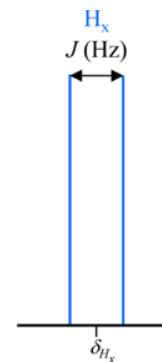
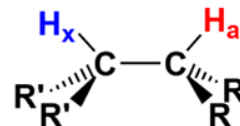
Površina ispod signala u spektru ^1H NMR proporcionalna je broju protona koji doprinose tom signalu.

- signal NMR promatrane jezgre cijepa se u multiplet s $2N + 1$ linija
- Za ^1H i ^{13}C jezgre s $I = 1/2$ broj linija u multipletu bit će **$N + 1$**

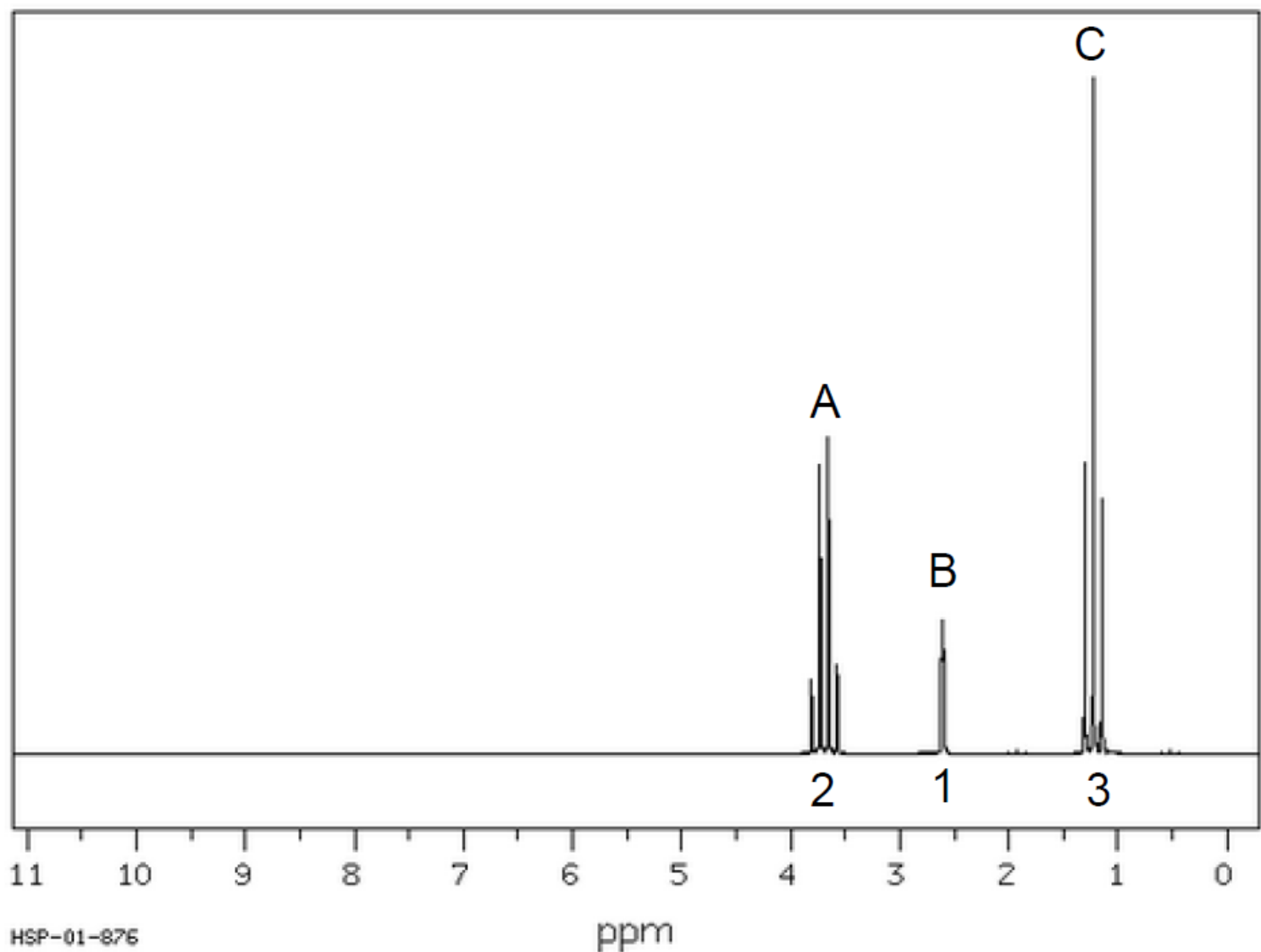
Broj susjednih NMR- aktivnih jezgara	Relativni intenzitet signala	Multipletnost signala
0	1	singlet (s)
1	1 1	dublet (d)
2	1 2 1	triplet (t)
3	1 3 3 1	kvartet (q)
4	1 4 6 4 1	kvintet
5	1 5 10 10 5 1	sektet
6	1 6 15 20 15 6 1	septet

Konstanta sprege:

- spin-spin sprega
- ne javlja se između kemijski ekvivalentnih jezgri
- daje važne strukturne informacije



3. Prikazan je ^1H NMR spektar etanola. Asignirajte spektar.

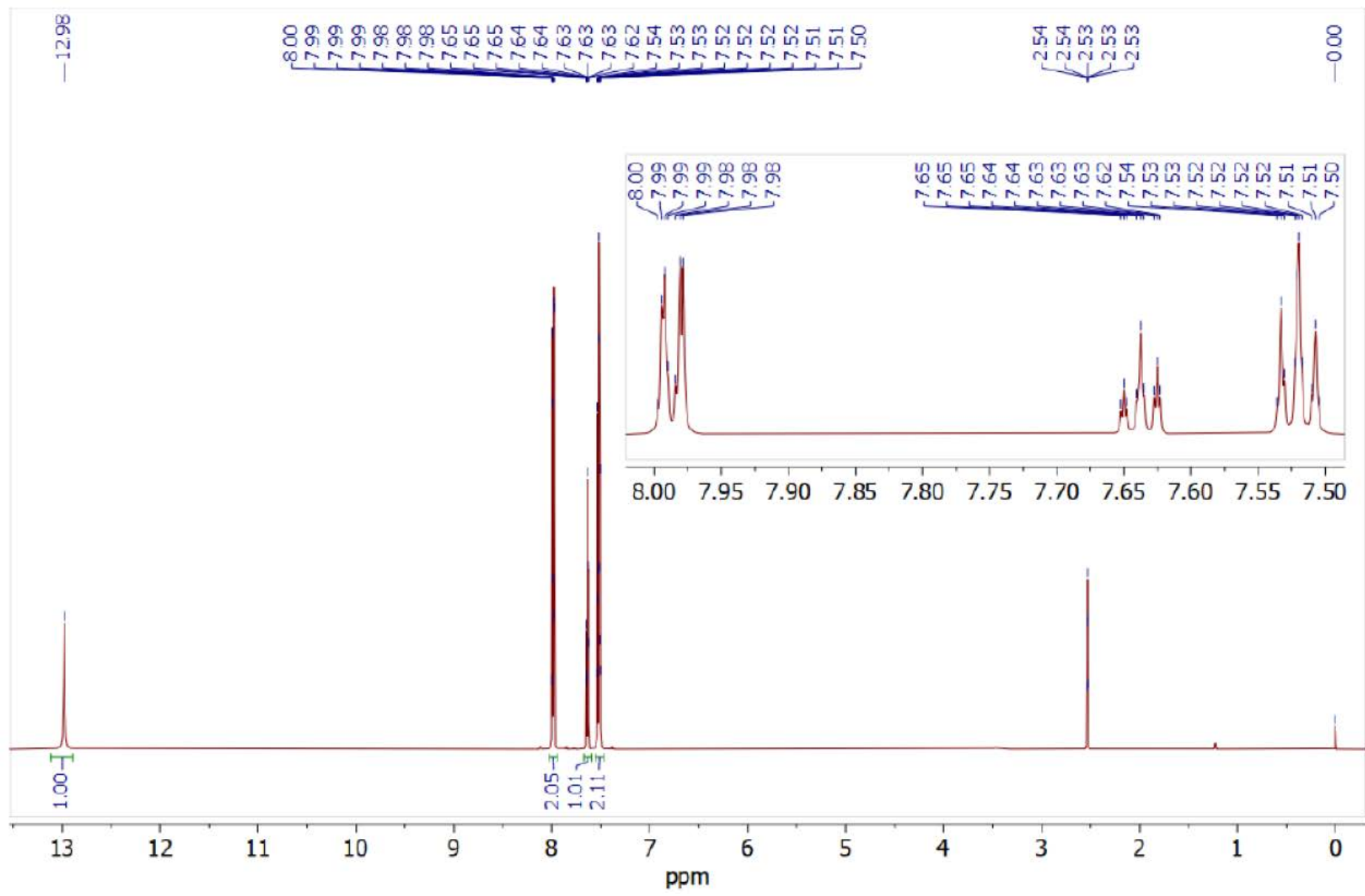


A 3,69 ppm

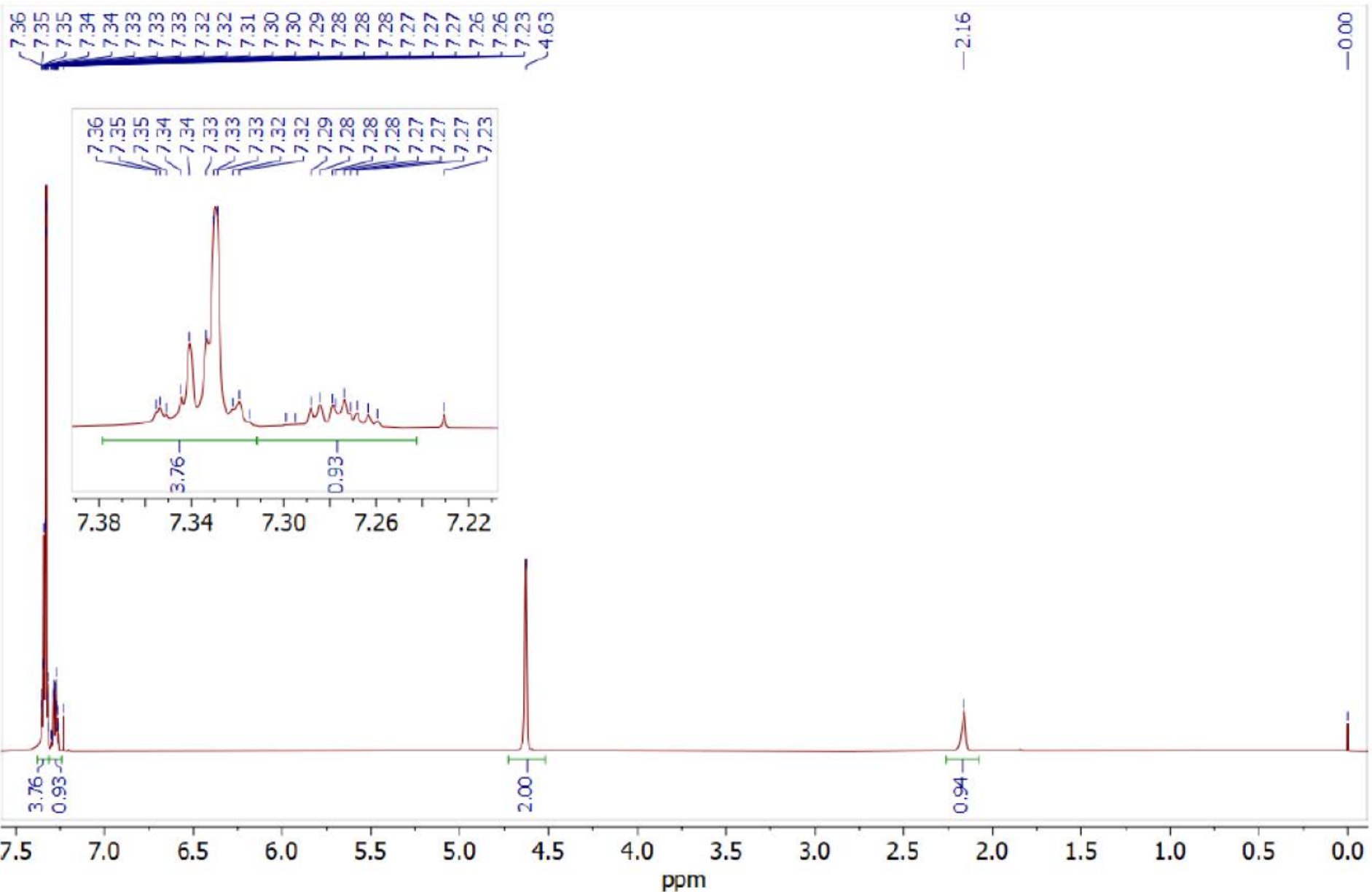
B 2,61 ppm

C 1,23 ppm

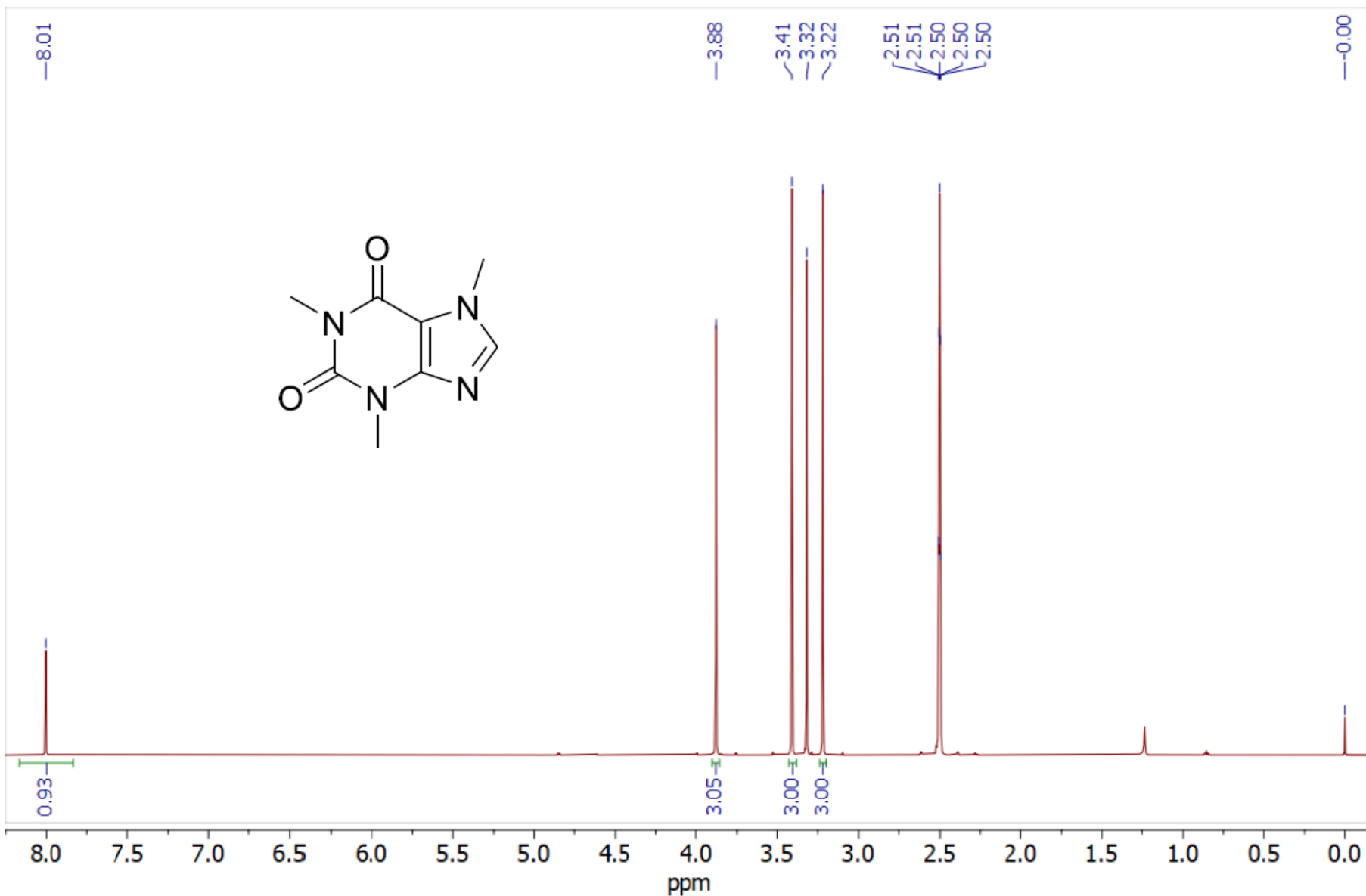
4. Prikazan je ^1H NMR spektar benzojeve kiseline. Asignirajte spektar.



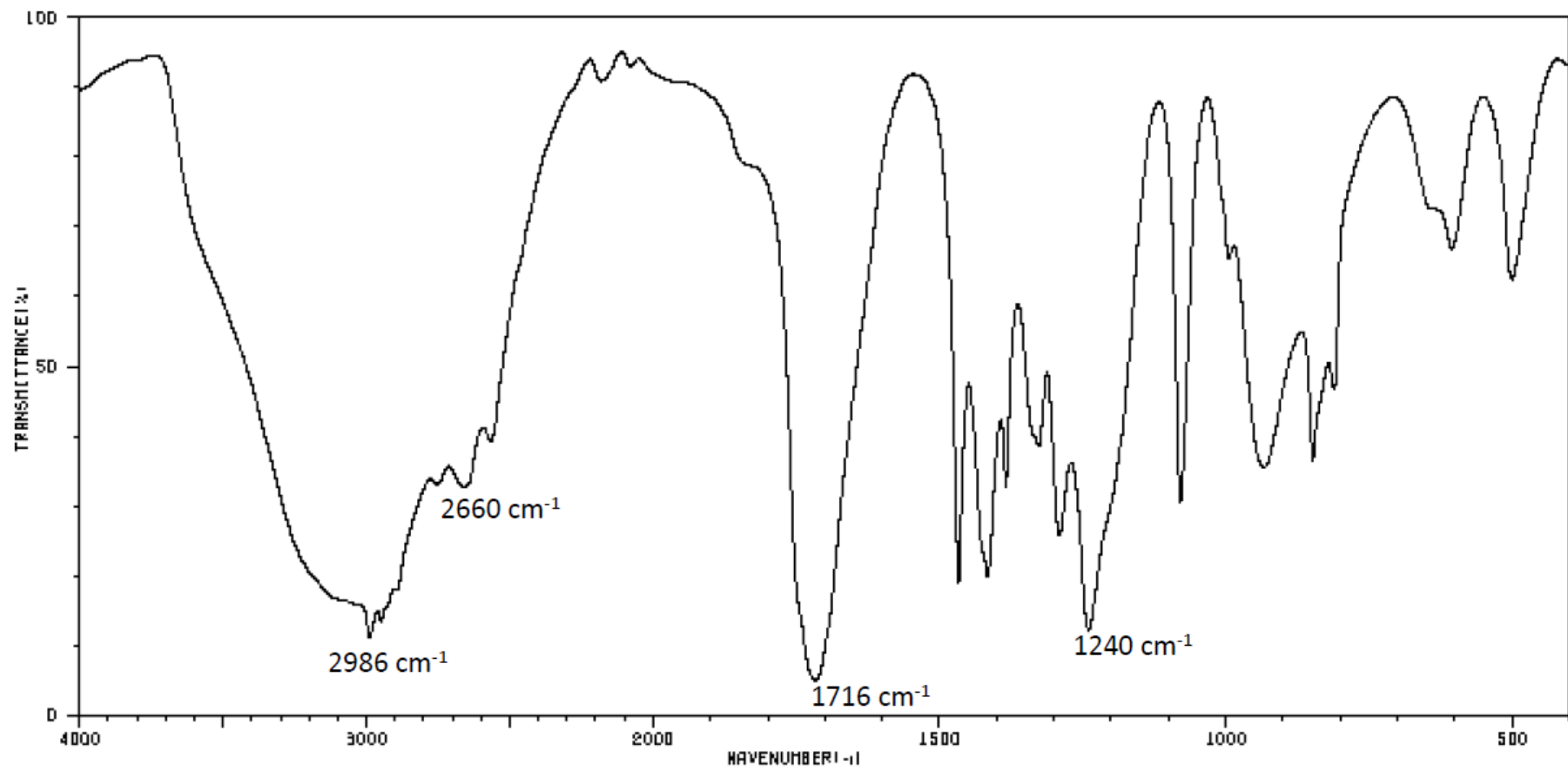
5. Prikazan je ^1H NMR spektar benzilnog alkohola. Asignirajte spektar.



6. Prikazan je ^1H NMR spektar molekule spoja kojeg ste uspješno izolirali u praktikumu. Prokomentirajte kako bi asignirali ovaj spektar.



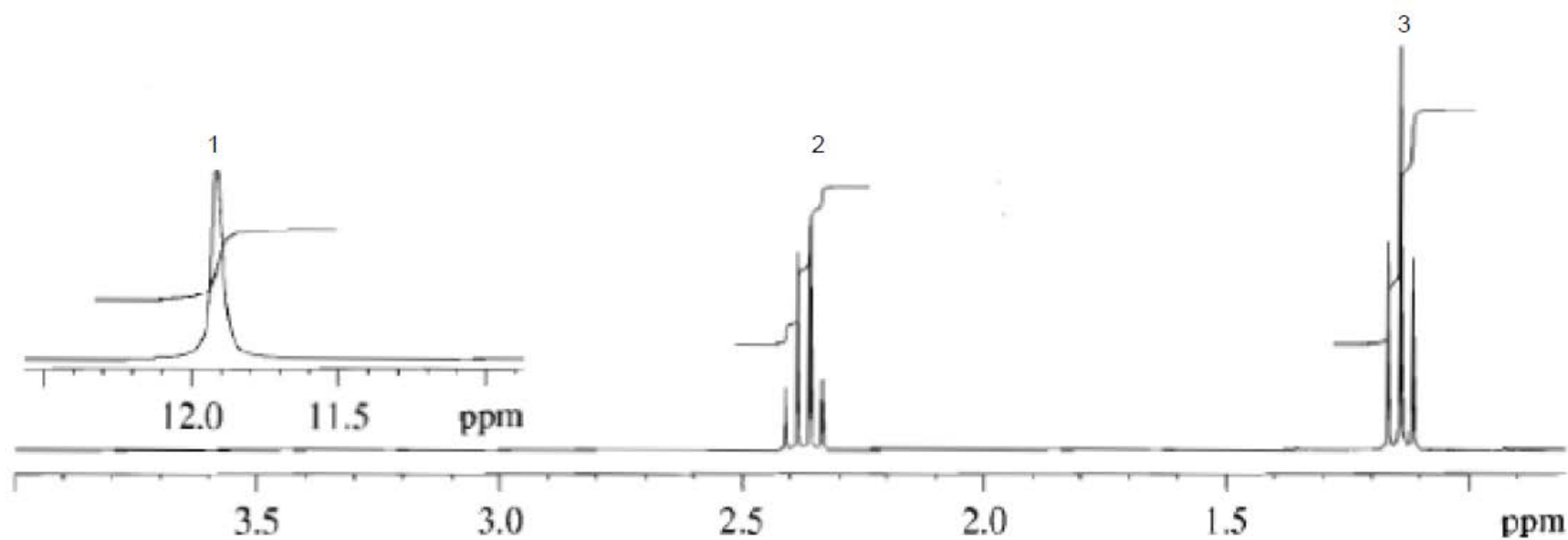
7. Iz priloženih IR i ^1H NMR spektara predložite strukturu molekule.



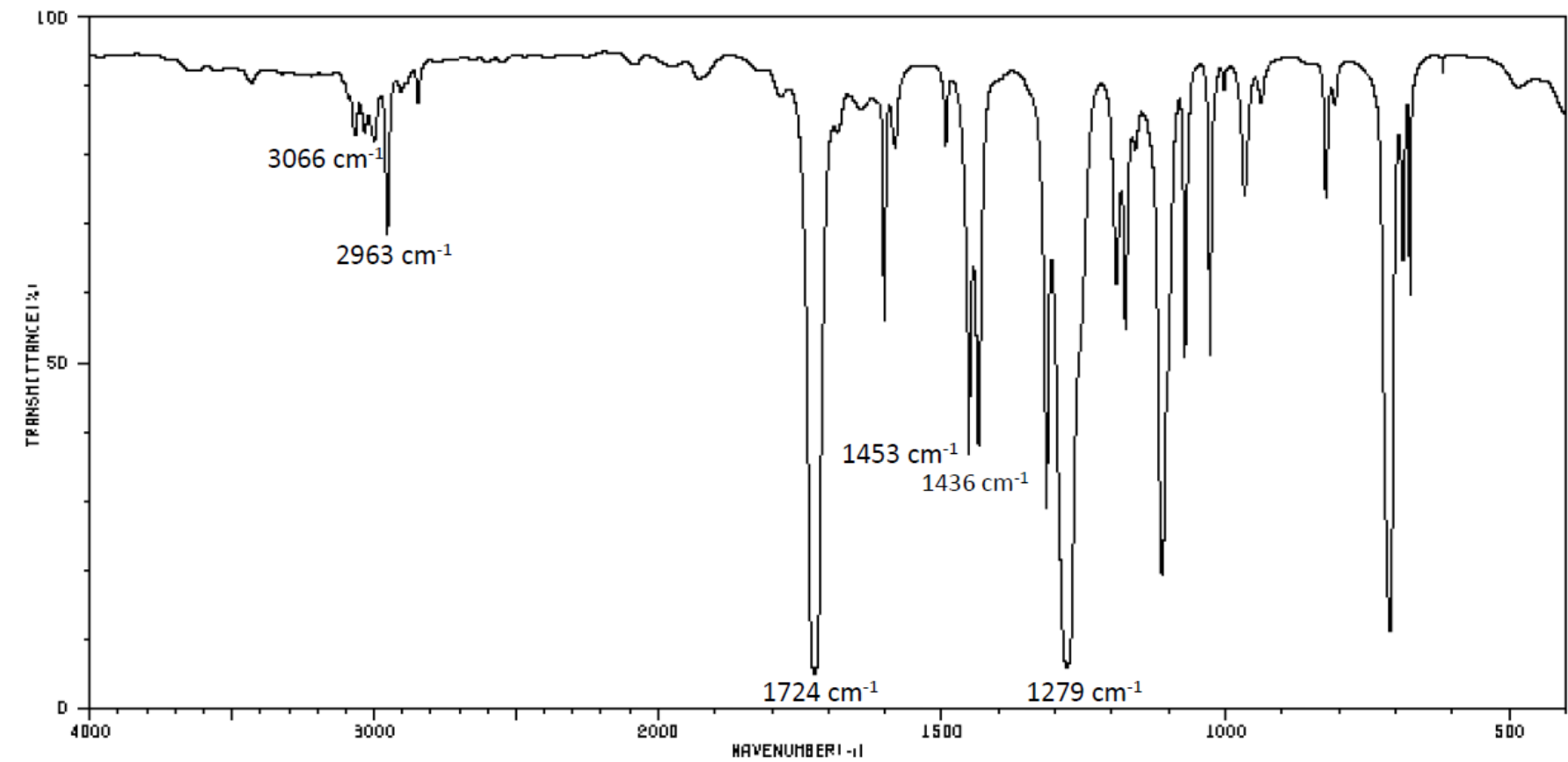
11,92 ppm

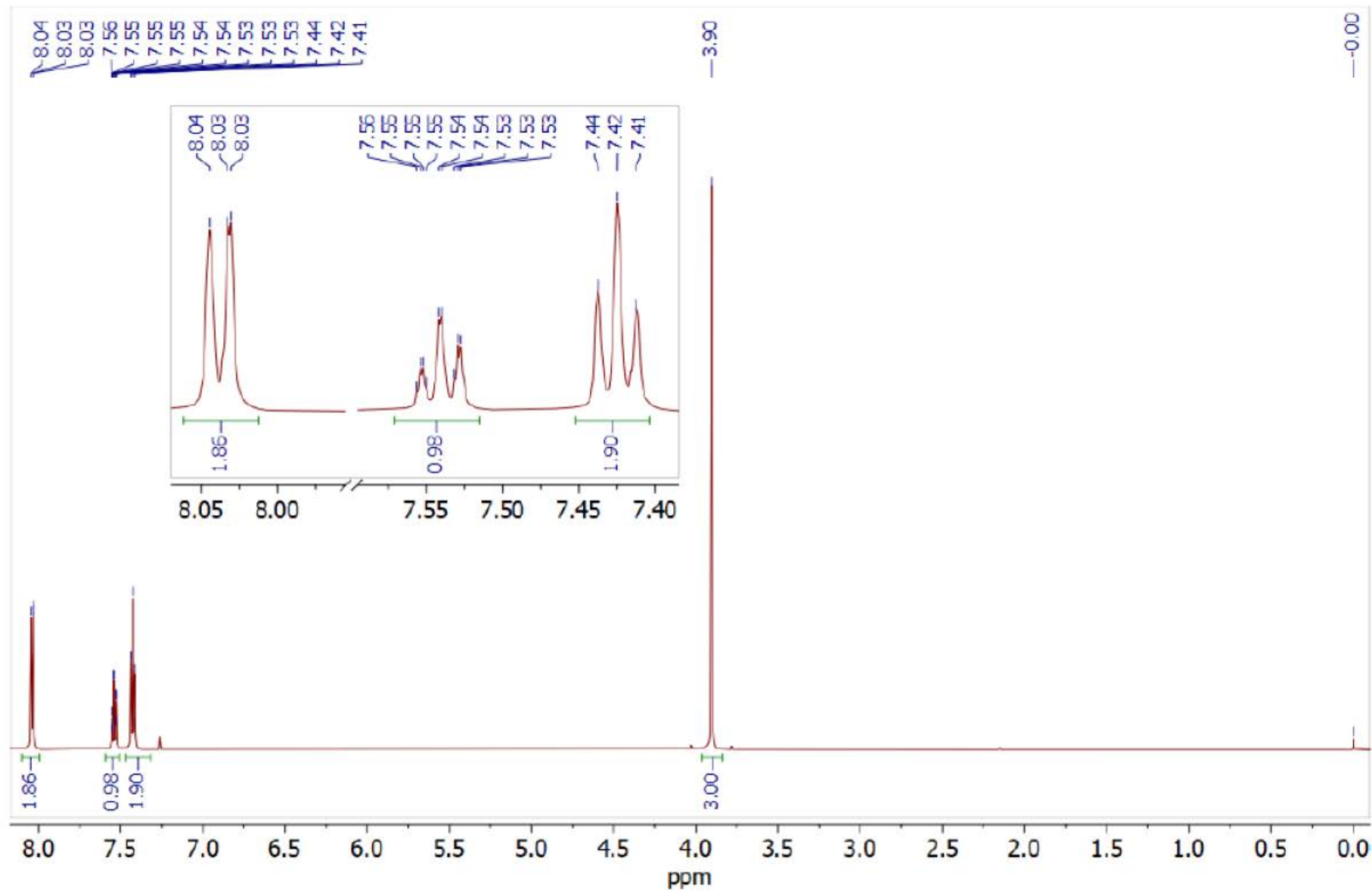
2,38 ppm

1,16 ppm



8. Iz priloženih IR i ^1H NMR spektara predložite strukturu molekule.





9. Fischerovom esterifikacijom butanske kiseline i etanola sintetizirali ste odgovarajući ester.

a) Napišite jednadžbu reakcije te imenujte dobiveni ester.

b) Dobivenom produktu snimili ste IR i ^1H NMR spektre te ste potvrdili da je sintetiziran željeni ester. Ispišite koje vrpce i kemijske pomake očekujete u spektrima.