
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 2001/2002

Februari/Mac 2002

KOE 321 – Spektroskopi Organik dan Kimia Organik Fizik

Masa : 3 jam

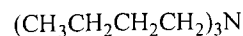
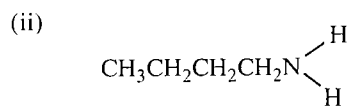
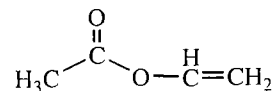
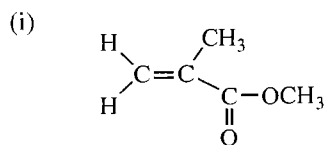
Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi SEMBILAN muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab sebarang LIMA soalan.

Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan, hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan akan diberi markah.

Jadual Tambahan dilampirkan.

1. (a) Jelaskan bagaimana spektroskopi infra merah boleh digunakan untuk membezakan antara struktur-struktur dalam pasangan yang berikut.

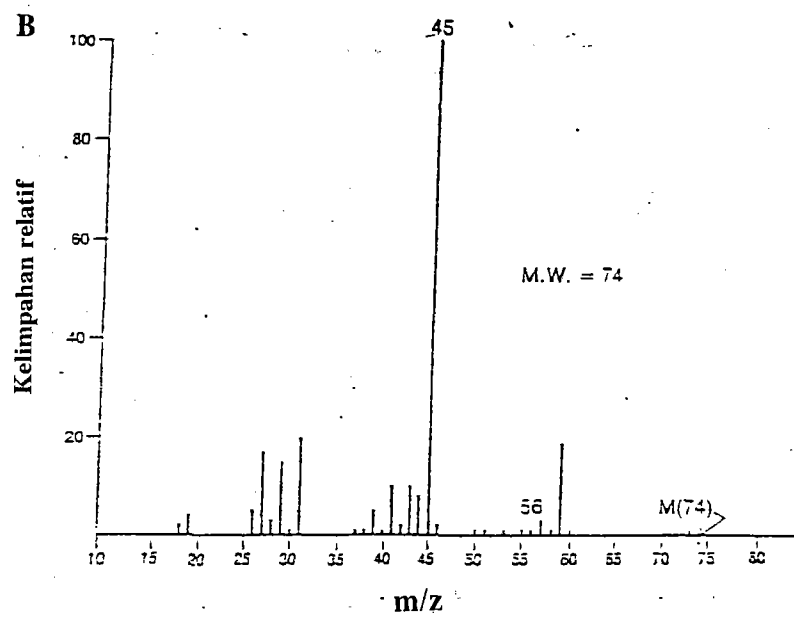
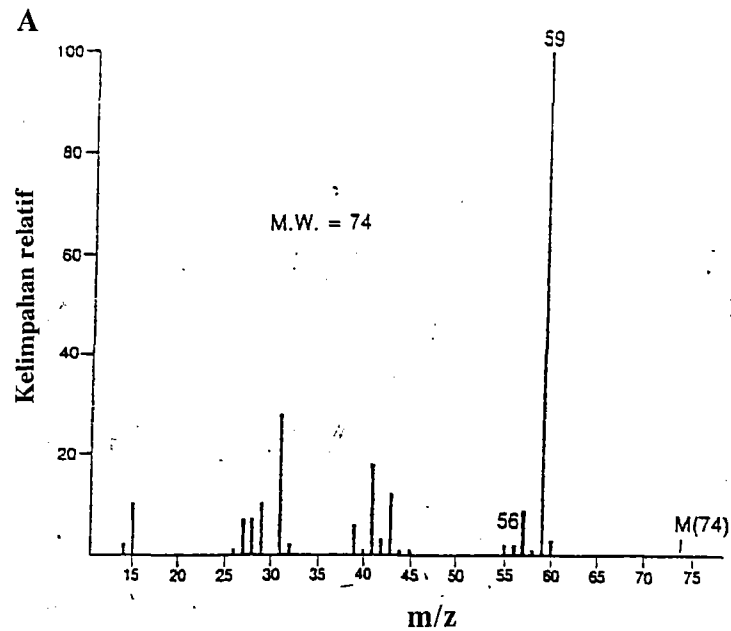


(6 markah)

.../2-

-2-

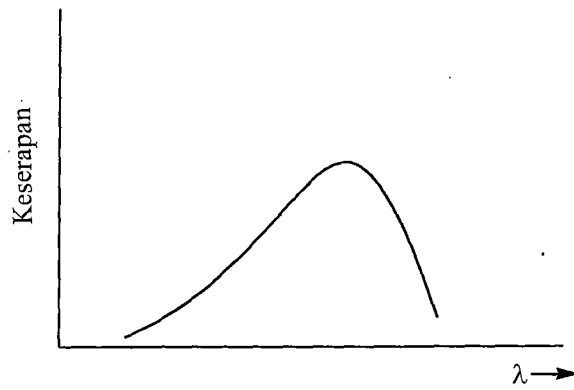
- (b) Spektrum jisim bagi sebatian isomerik A dan B mempunyai formula $C_4H_{10}O$. Tentukan struktur bagi dua sebatian ini.



(10 markah)

.../3-

- (c) Berikan definisi kromofor. Lukiskan bentuk spektrum yang dianjakkan secara batokrom relatif kepada spektrum di bawah



(4 markah)

-4-

2. (a) Butanoil klorida, apabila bertindak balas dengan ion butanoat memberi suatu hasil yang mempunyai sifat-sifat spektrum yang berikut:

Spektrum jisim: m/z 158, 71, 70, 55

IR: 3000, 1820, 1755 cm^{-1}

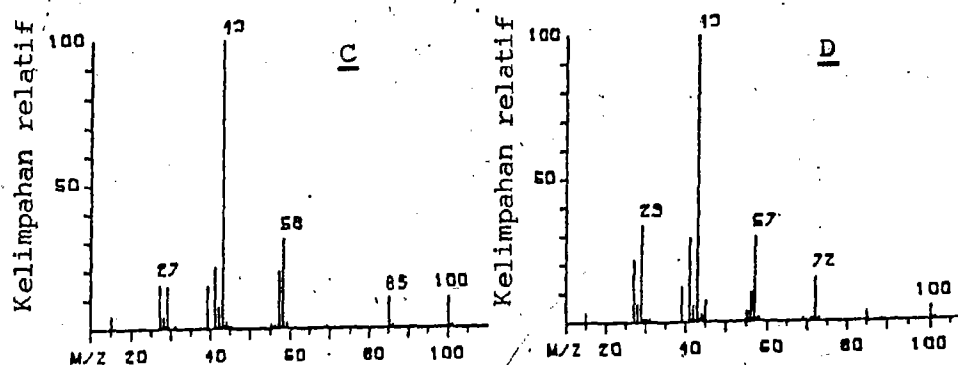
UV: Tiada penyerapan melebihi 210 nm

Deduksikan struktur dan lakarkan spektrum ^1H NMR bagi hasil ini.

(10 markah)

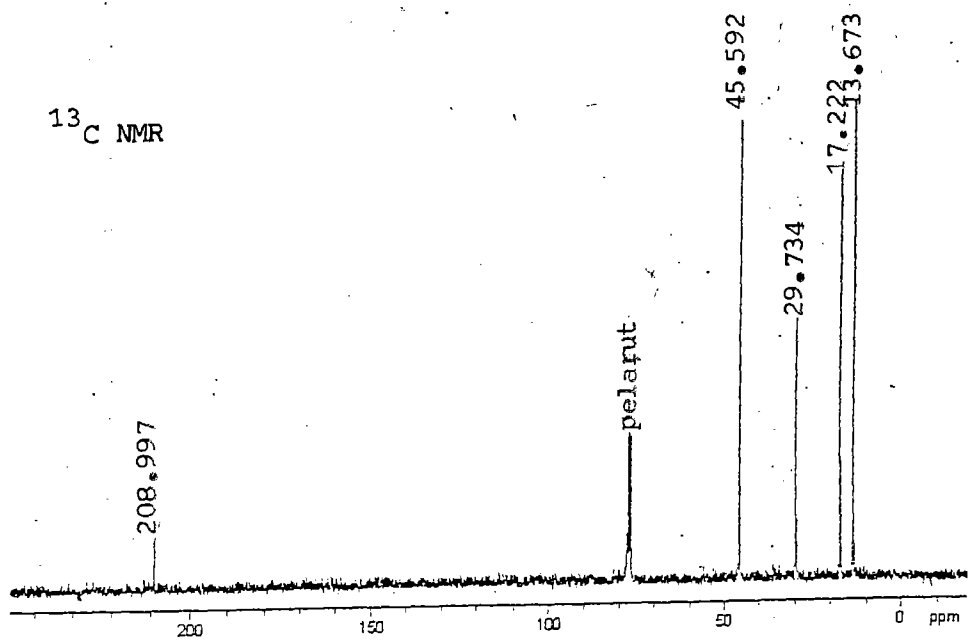
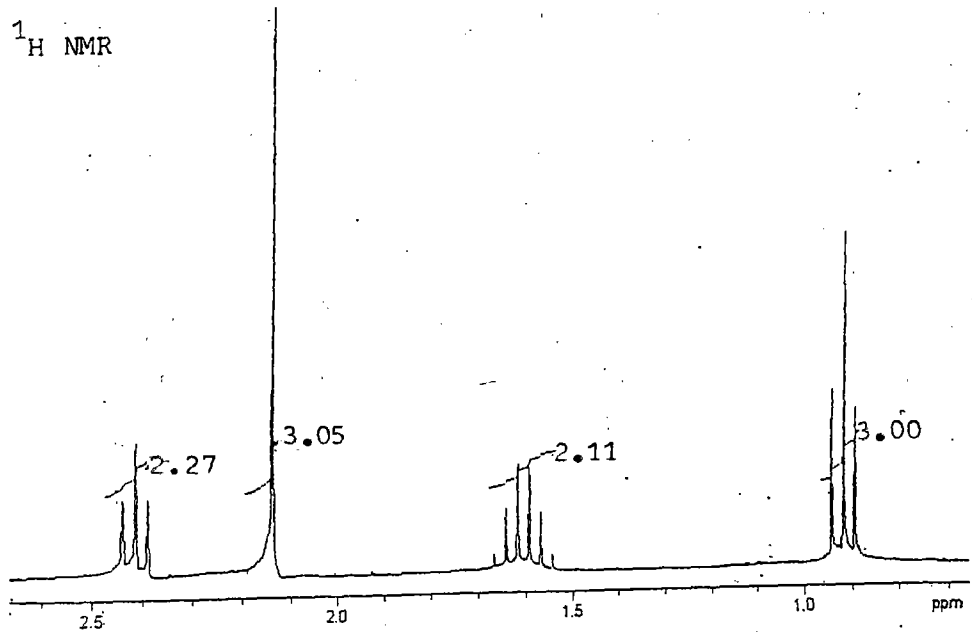
- (b) Untuk spektrum jisim C dan D di bawah, kenalpastikan spektrum jisim yang manakah bersesuaian dengan sebatian 3-metil-2-pentanon dan 4-metil-2-pentanon melalui mekanisme penyerpihan yang sesuai.

(10 markah)

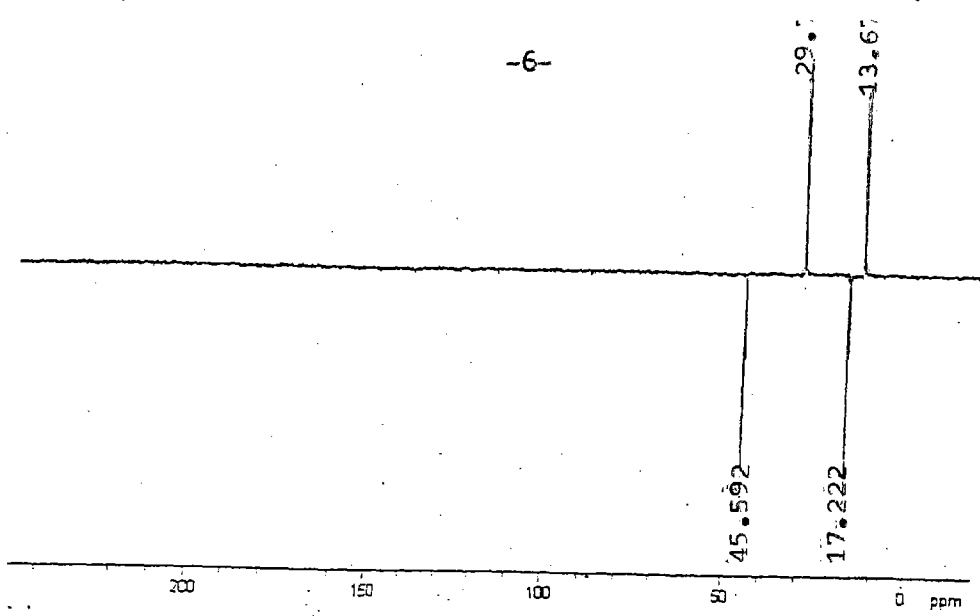


3. Cadangkan struktur dan nama sebatian yang mempunyai formula $C_5H_{10}O$ berdasarkan spektrum-spektrum yang berikut. Jelaskan jawapan anda.

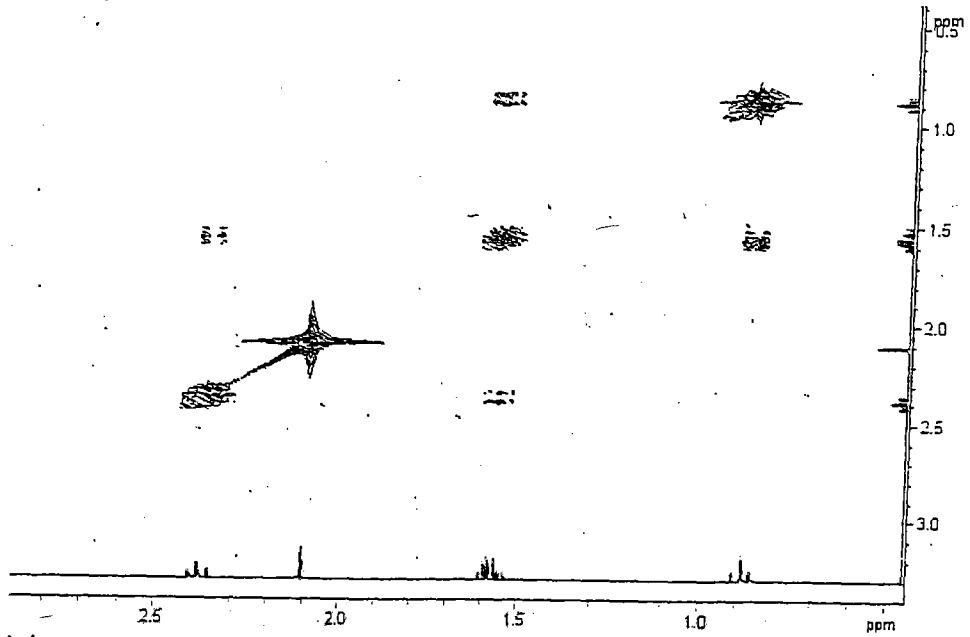
(20 markah)



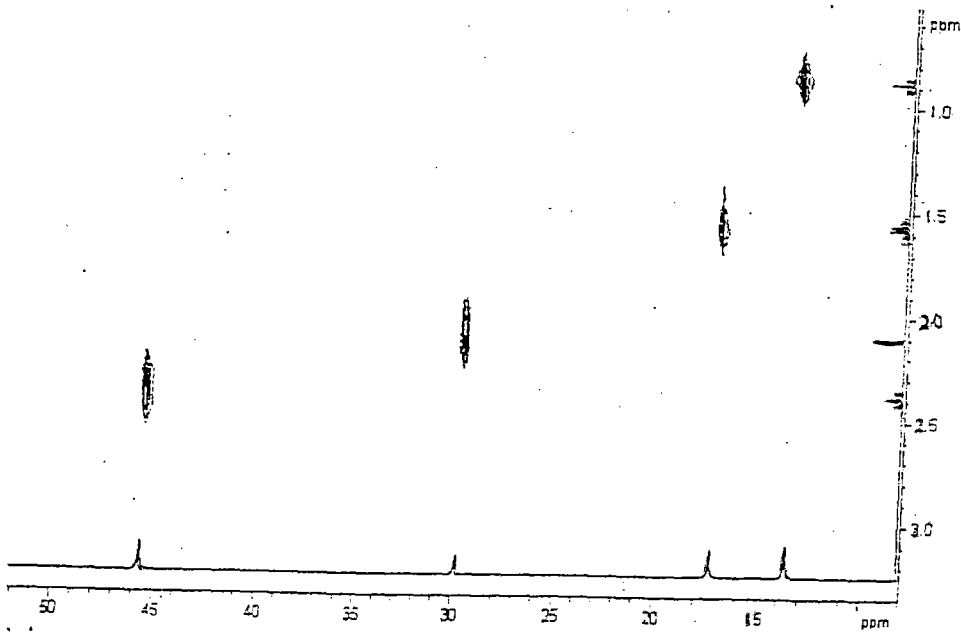
DEPT



COSY

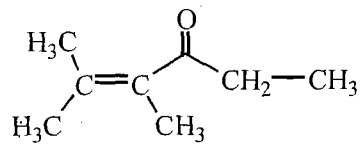


HETCOR

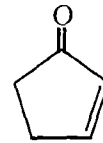


4. (a) Dengan menggunakan jadual korelasi, kirakan λ_{\max} bagi sebatian-sebatian di bawah.

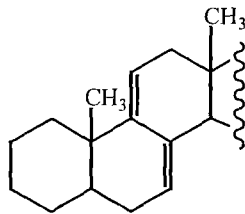
(i)



(ii)



(iii)



(10 markah)

- (b) Terangkan setiap sebutan yang berikut:

- (i) pasangan ion rapat
- (ii) pasangan ion
- (iii) kesan garam normal
- (iv) kesan garam istimewa

(10 markah)

5. (a) Berikan satu contoh bagi setiap plot Hammett yang berikut:

- (i) plot Hammett yang menggunakan nilai-nilai σ^+
- (ii) plot Hammett yang menggunakan nilai-nilai σ^-
- (iii) plot Hammett yang menggunakan nilai-nilai σ^0
- (iv) plot Hammett yang menggunakan nilai-nilai σ_1

(12 markah)

- (b) Terangkan bagaimana pelarut, suhu dan jarak penukarganti dari pusat tindak balas mempengaruhi magnitud nilai ρ .

(8 markah)

6. (a) Berikan satu contoh yang boleh membezakan kesan induktif daripada kesan medan dan satu contoh yang tidak boleh membezakan dua kesan ini.

(8 markah)

- (b) Setiap faktor yang berikut boleh mempengaruhi kekuatan sesuatu asid. Berikan satu contoh bagi setiap kes.

- (i) kearomatikan
- (ii) penghibridan
- (iii) kesan resonans
- (iv) kesan induktif

(12 markah)

7. (a) Terbitkan fungsi keasidan, H_0 .

(4 markah)

- (b) Huraikan bagaimana anda boleh menentukan nilai pK_a bagi 4-bromoanilina.

(16 markah)

Lampiran: Jadual-Jadual Spektroskopi

¹ H NMR	
	δ (ppm)
RCH ₃	0.9
R ₂ CH ₂	1.3
R ₃ CH	1.5
C=C-H	4.6 - 5.9
C≡C-H	2.0 - 3.0
Ar-H	6.0 - 8.5
Ar-C-H	2.2 - 3.0
C=C-CH ₃	1.7
H-C-F	4.0 - 4.5
H-C-Cl	3.0 - 4.0
H-C-Br	2.5 - 4.0
H-C-I	2.0 - 4.0
H-C-OH	3.4 - 4.0
H-C-OR	3.3 - 4.0
RCOO-C-H	3.7 - 4.1
H-C-COOR	2.0 - 2.2
H-C-COOH	2.0 - 2.6
H-C-C=O	2.0 - 2.7
R-CHO	9.0 - 10.0
R-OH	1.0 - 5.5
Ar-OH	4.0 - 12.0
C=C-OH	15 - 17
RCOOH	10.5 - 12.0
RNH ₂	1.0 - 5.0

Penyerapan Inframerah	
	cm ⁻¹
=C-H	3020 - 3080 (m)
=C-H	675 - 1000
C=C	1640 - 1680
≡C-H	3300
=C-H	600 - 700
C≡C	2100 - 2260
Ar-H	3000 - 3100
Ar-H	675 - 870
C=C	1500 - 1600
O-H	3610 - 3640
O-H	3200 - 3600 (lebar)
C-O	1080 - 1300
C=O	1690 - 1760 (s)
O-H	2500 - 3000 (lebar)
C-O	1080 - 1300
C=O	1690 - 1760
N-H	3300 - 3500
C-N	1180 - 1360
-NO ₂	1515 - 1560
	1345 - 1385

¹³ C NMR	
	δ (ppm)
C-I	0 - 40
C-Br	25 - 65
C-Cl	35 - 80
-CH ₃	8 - 30
-CH ₂ -	15 - 55
-CH-	20 - 60
=C	65 - 85
≡C	100 - 150
C-O	40 - 80
C=O	170 - 210
C(Ar)	110 - 160
C-N	30 - 65
C≡N	110 - 125

Perkiraan λ _{max} bagi diena konjugat	
	nm
Nilai asas bagi diena homoanular	253
Nilai asas bagi diena heteroanular atau diena rantai terbuka	214
Tambahan untuk:	
C=C tambahan berkonjugat	+ 30
penukar ganti alkil atau baki gelang	+ 5
C=C eksosiklik	+ 5
penukar ganti berikut:	
-OAc	+ 0
-OR	+ 6
-SR	+ 30
-Cl, -Br	+ 5
-NR ₂	+ 60

Perkiraan λ _{max} bagi enon (karbonil taktepu)	
	nm
Nilai-nilai asas bagi:	
keton α,β-taktepu asiklik	215
keton α,β-taktepu gelang enam	215
keton α,β-taktepu gelang lima	202
aldehid α,β-taktepu	210
asid kartoksilik α,β-taktepu	195
ester α,β-taktepu	195
Tambahan bagi:	
C=C tambahan berkonjugat	+ 30
diena konjugat homoanular	+ 39
C=C eksosiklik	+ 5
alkil atau baki gelang pada kedudukan:	
α	+ 10
β	+ 12
γ dan seterusnya	+ 18
Penukar ganti berikut:	
-OH pada kedudukan:	
α	+ 35
β	+ 30
δ	+ 50
-OAc pada kedudukan:	
α, β, δ	+ 6
-OR pada kedudukan:	
α	+ 35
β	+ 30
γ	+ 17
δ	+ 31
-Cl pada kedudukan:	
α	+ 15
β	+ 12
-Br pada kedudukan:	
α	+ 25
β	+ 30
-NR ₂ pada kedudukan	β + 95

Berat Atom Tepat	
H	= 1.00794
C	= 12.01115
N	= 14.0067
O	= 15.9994
F	= 18.9984
Cl	= 35.4527
Br	= 79.9094
I	= 126.9045
Si	= 28.0855
P	= 30.9738
S	= 32.066