

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester I

Sidang 1995/1996

Oktober/November 1995

KOE 352 - Spektroskopi Organik

Masa: [3 jam]

Jawab separang LIMA soalan

Hanya LIMA jawapan yang pertama sahaja akan diperiksa

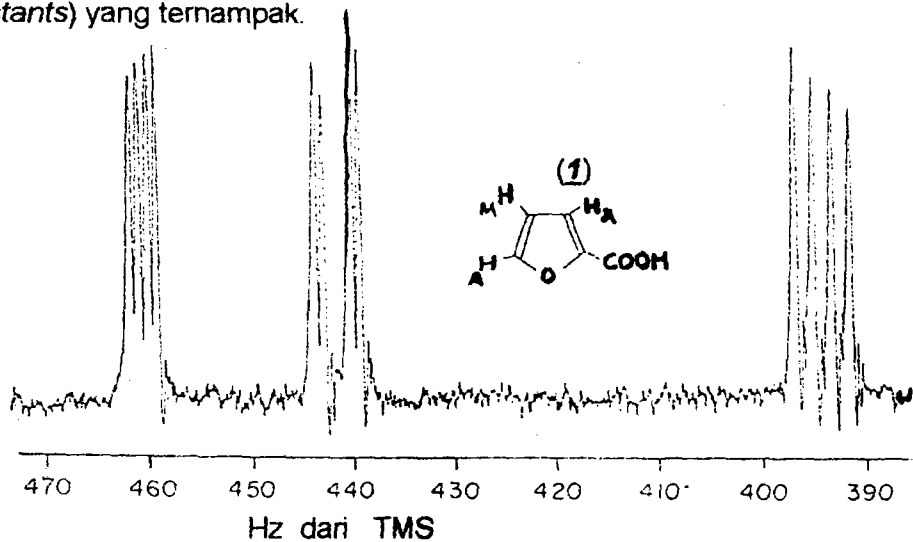
Jawab tiap-tiap soalan pada muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi TUJUH soalan semuanya (12 muka surat)

1. (a) Lukiskan paras tenaga spin bagi nukleus hidrogen dalam susunan H-C-H yang menjelaskan pemisahan isyarat NMR tiap-tiap proton ini kepada corak *doublet*.

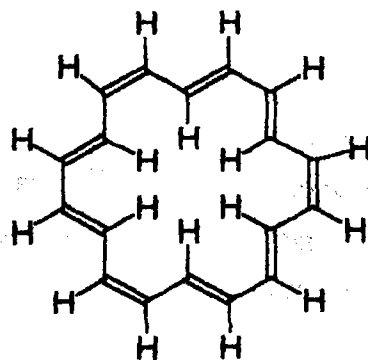
[6 markah]

- (b) Sebahagian daripada spektrum NMR 60 Mhz bagi asid 2-furoik (1) diberikan di bawah. Kirakan anjakan kimia dalam ppm dari TMS bagi setiap kelompok isyarat yang kelihatan kemudian peruntukkan kepada H_M , H_A dan H_X . Dapatkan juga semua pemalar pengkupelan (*coupling constants*) yang ternampak.



[10 markah]

1. (c) Yang mana kumpulan proton pada 18-annulena (2) dijumpai pada anjakan kimia -3.00 ppm dan pada 9.3 ppm dalam spektrum NMR-nya. Jelaskan jawapan dan nyatakan pula yang manakah bawah medan, atas medan, terlindung dan nyahlindung (*deshielded*).



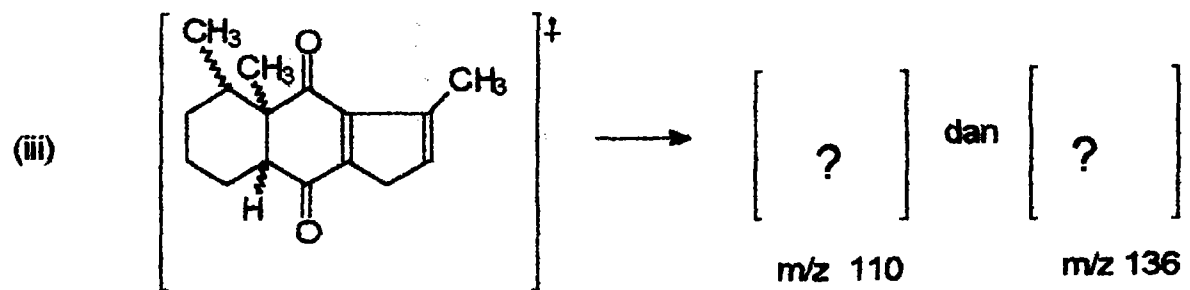
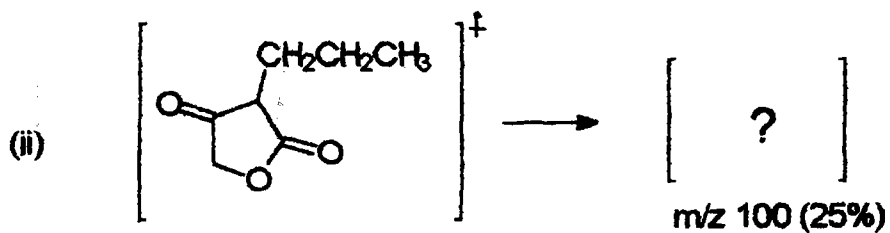
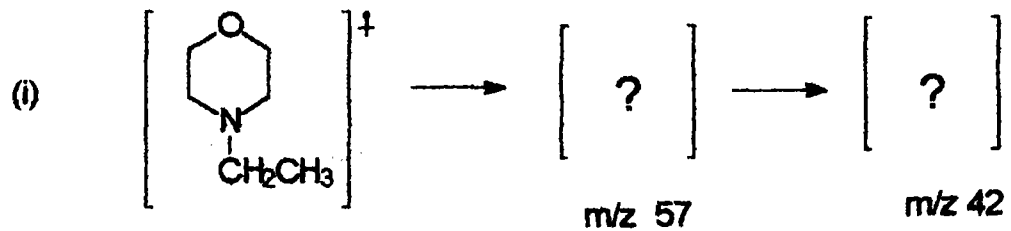
(2)

[4 markah]

2. Kenalpastikan struktur bagi setiap sebatian yang disifatkan di bawah ini:
- (a) Sebatian $C_5H_8O_2$ ini mempunyai penyerapan IR (infra-merah) pada 1760 cm^{-1} dan hanya dua isyarat singlet proton NMR dengan nisbah 3:1 sahaja. Isyarat yang kurang amat ini ditempatkan lebih bawah medan.
- (b) Sebatian ini mempunyai $[M]^+$ pada m/z 107. Multiplisiti (corak pengkupelan) yang tertinggi sekali kelihatan dalam spektrum $^{13}\text{C-NMR off-resonance}$ ialah triplet. Terdapat juga penyerapan IR pada 1500 cm^{-1} dan 1602 cm^{-1} .
- (c) Sebatian $C_6H_3Br_3$ ini menunjukkan hanya satu singlet sahaja pada 7.8 ppm dalam spektrum proton NMR-nya.
- (d) Sebatian $C_8H_{18}O$ ini hanya mempunyai penyerapan sekitar 2890 cm^{-1} dalam julat IR $1500 - 3600\text{ cm}^{-1}$. Ia juga mempunyai hanya satu isyarat singlet yang tajam pada 1.1 ppm (dari TMS) sahaja pada proton NMR-nya.

[20 markah]

3. (a) Jelaskan struktur serpihan yang terbentuk daripada ion induk yang ditunjukkan di bawah ini:



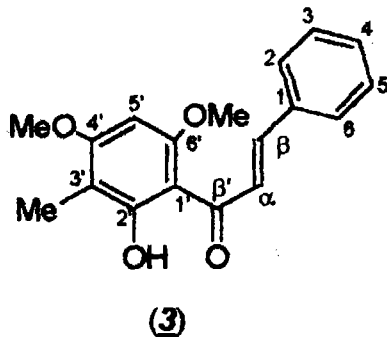
[12 markah]

- (b) Berikan struktur bagi sebatian di bawah yang boleh mematuhi sifat proton NMR yang diberi bersama-sama ini:

- (i) $C_4H_8O_2$: ($CDCl_3$) δ 0.95 (3H,t), 1.7 (2H,m), 4.25 (2H,t) dan 8.00 (1H,s)
- (ii) $C_4H_7BrO_2$: ($CDCl_3$) δ 1.3 (3H,t), 4.23 (2H,q) dan 3.77 (2H,s)
- (iii) $C_3H_5ClO_2$: ($CDCl_3$) δ 3.61 (3H,s) dan 4.08 (2H,s)

[8 markah]

4. Sebatian (3) ini mempunyai spektrum ^{13}C sepertimana dijadualkan bersama-sama dengan maklumat yang boleh didapati daripada 2-D COLOC (*Correlation via Long Range Couplings*). Peruntukkan sebanyak mungkin isyarat ^{13}C kepada karbon-karbon tertentu bagi (3).



Isyarat ^{13}C yang ternampak

δ	<u>multiplisiti</u>
86.0	d
105.6	s
106.0	s
126.5	d (2 C)
127.8	d
128.7	d (2 C)
129.9	d
135.5	s
141.6	d
161.0	s
163.5	s
164.2	s
192.8	s
dan tiga lagi isyarat kuartet	

Keputusan 2-D COLOC

Pengkupelan jenis $^3J_{\text{C,H}}$ terdapat pula antara pasangan proton-karbon ini:

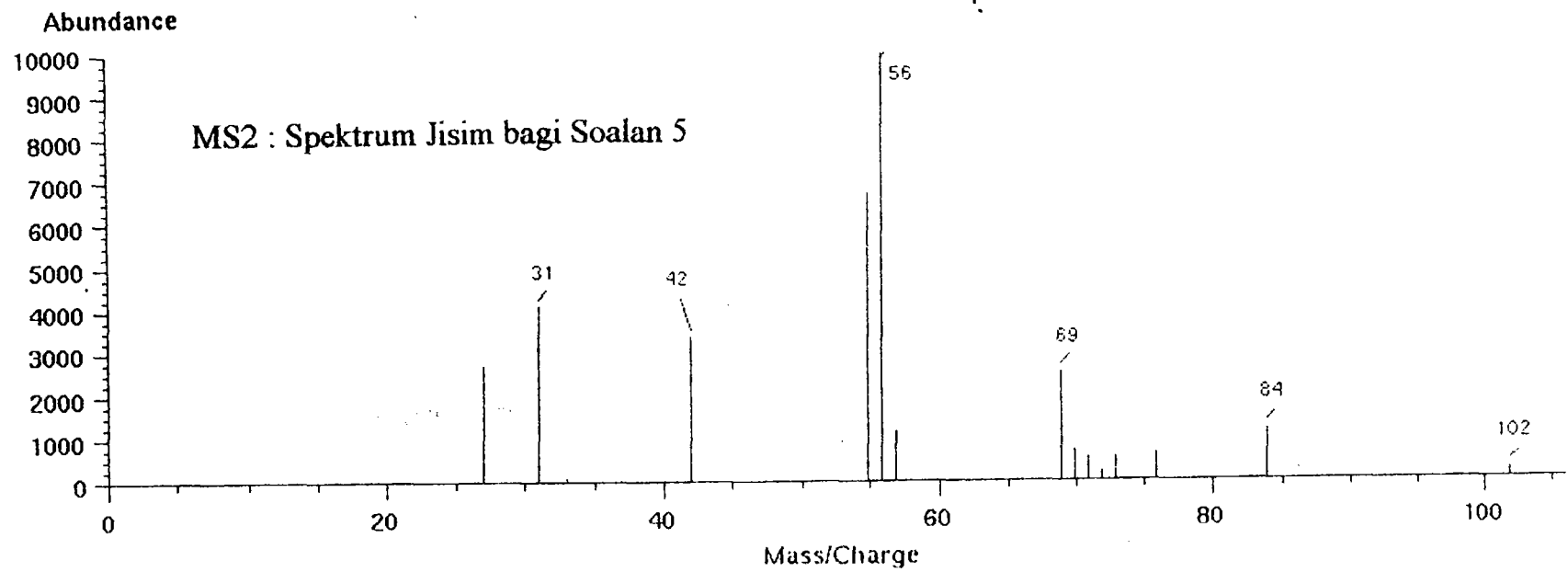
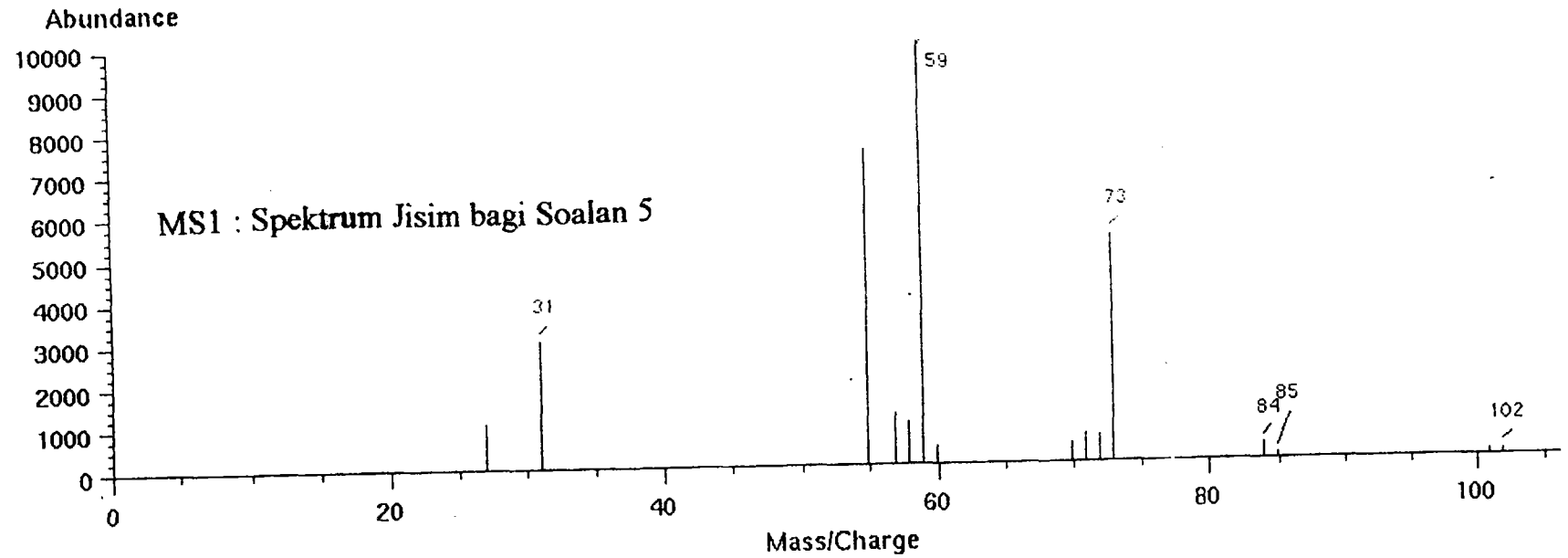
- 8.15 ppm (1H,d) dengan 192.8 ppm (C) dan 126.5 ppm (C)
- 7.78 ppm (1H,s) dengan 105.6 ppm (C) dan 106.0 ppm (C)
- 8.00 ppm (1H,d) dengan 106.0 ppm (C) dan 135.5 ppm (C)

[20 markah]

5. (a) Spektrum jisim (MS1, MS2 dan MS3) bagi 1-heksanol (4), 2-heksanol (5) dan 3-heksanol (6) diberikan bersama-sama soalan ini. Pasangkan setiap satu alkohol ini dengan spektrum jisimnya. Berikan penjelasan penuh mengenai pilihan anda.

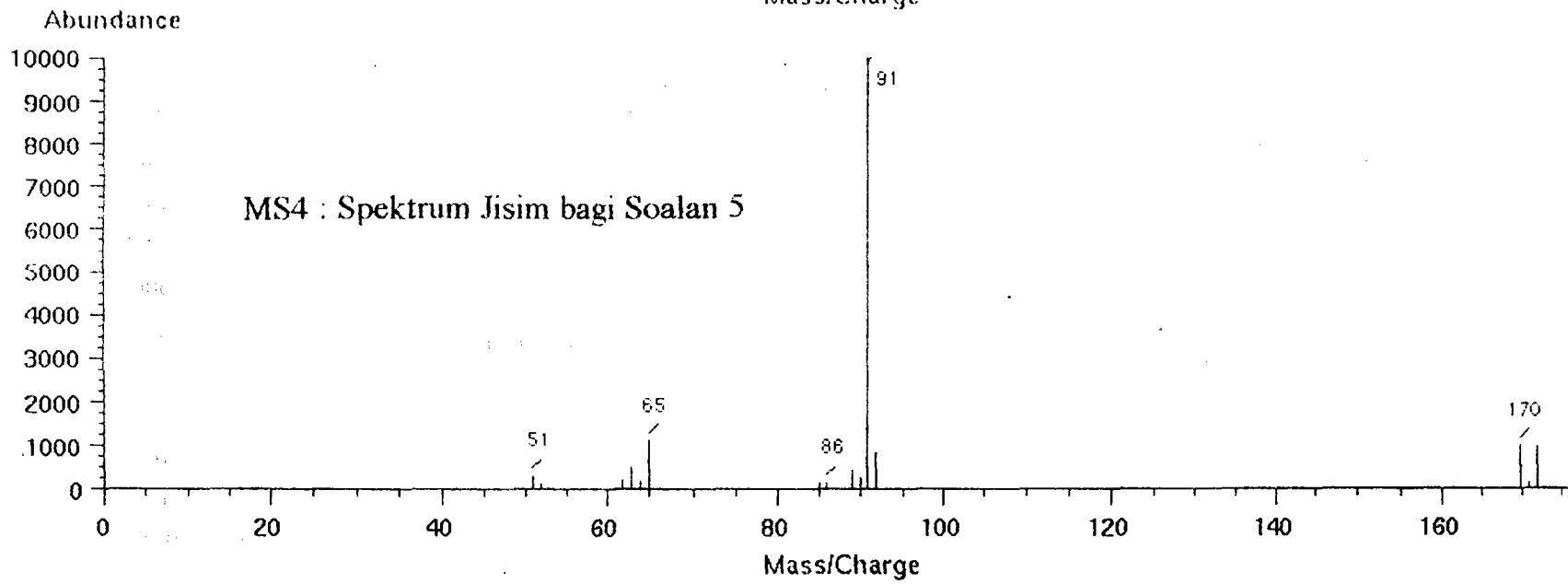
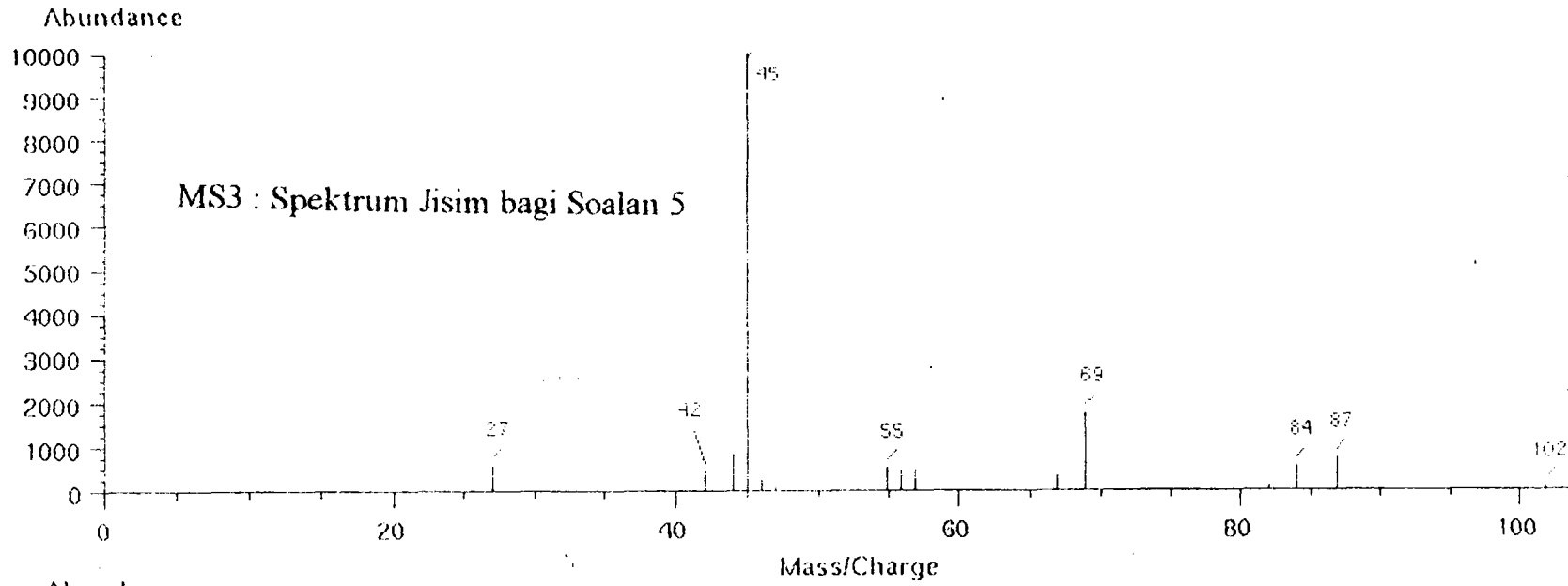
[6 markah]

Spektrum jisim bagi Soalan 5(a)

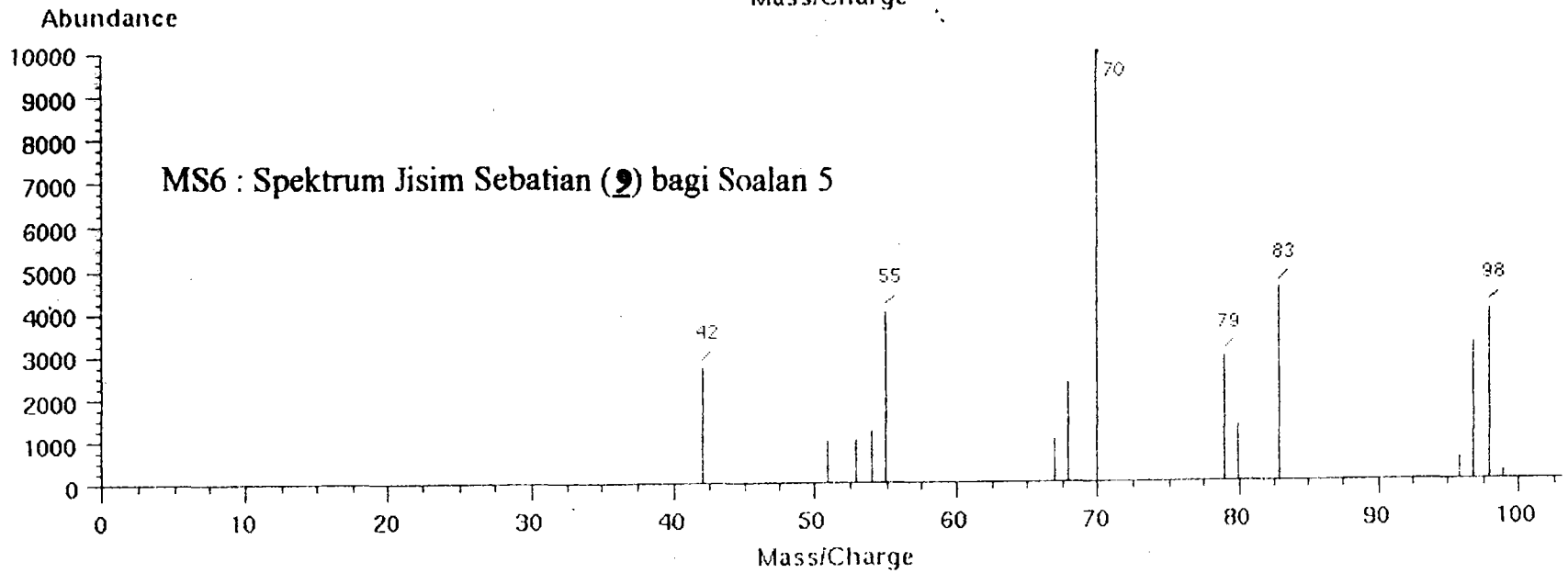
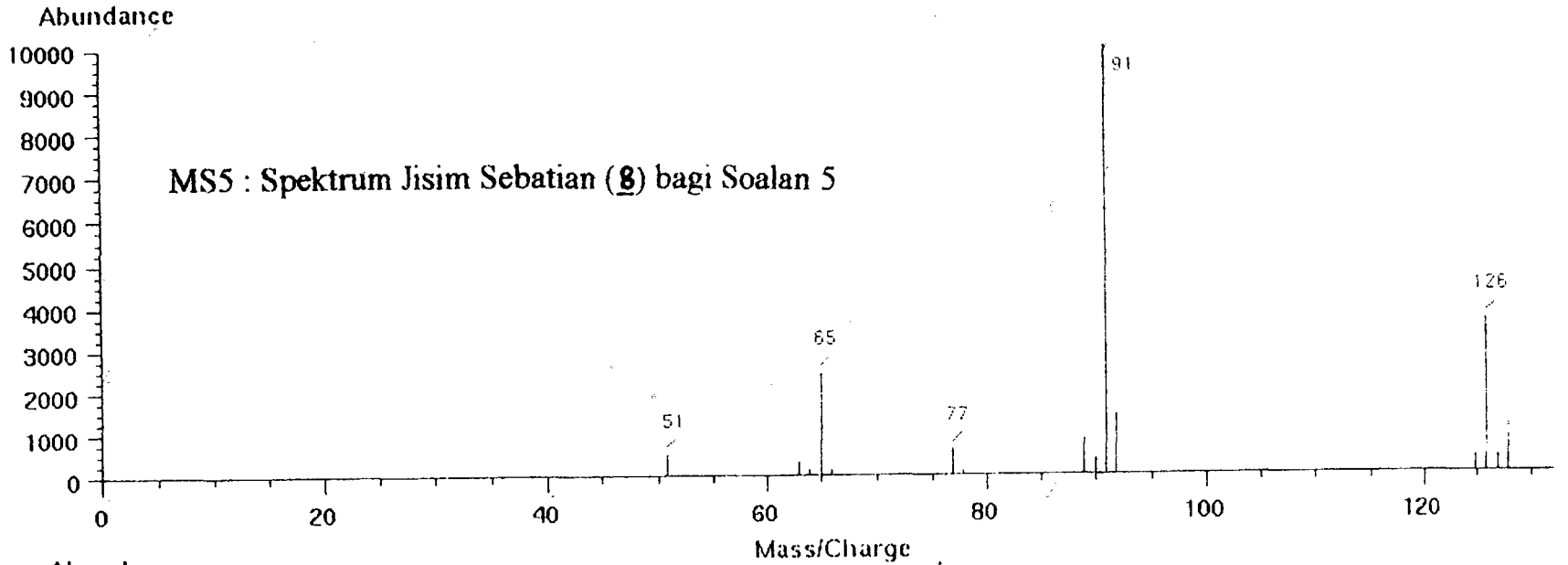


(XOE 352)

Spektrum Jisim bagi Soalan 5(a) dan 5(b)



Spektrum Jisim bagi Soalan 5(b) dan 5(c)

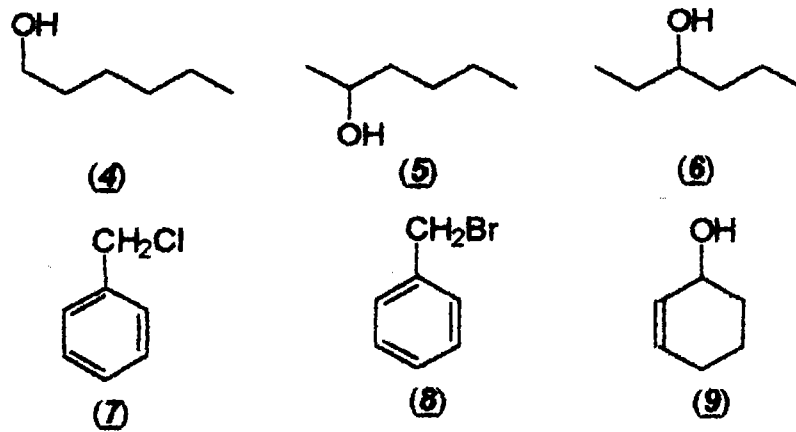


5. (b) Spektrum jisim bagi klorometilbenzena (MS4, **7**) dan bromometilbenzena (MS5, **8**) diberikan pula. Jelaskan kehadiran sebanyak mungkin puncak-puncak yang kelihatan.

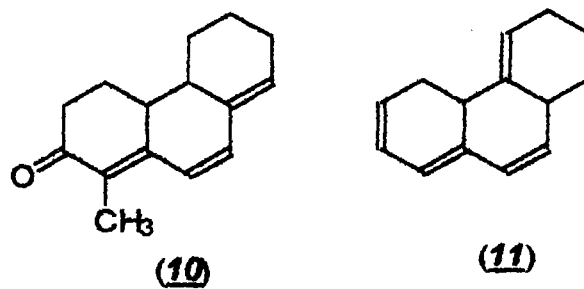
[6 markah]

- (c) Dalam spektrum jisim (MS6) bagi 2-sikloheksen-1-ol (**9**) yang diberikan bersama-sama soalan ini, pilihlah serpihan **tertandakan** yang berbentuk **kation** sahaja dan jelaskan struktur mereka.

[8 markah]

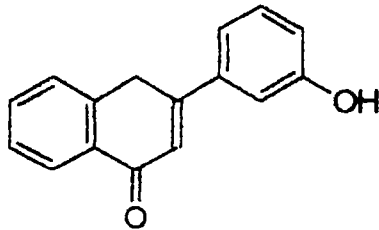
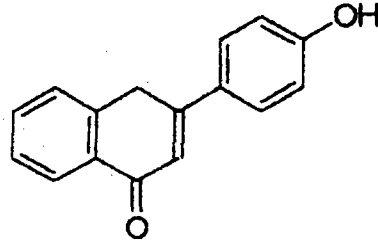


6. (a) Apakah λ_{maks} yang dijangka bagi sebatian (**10**) dan (**11**) ?



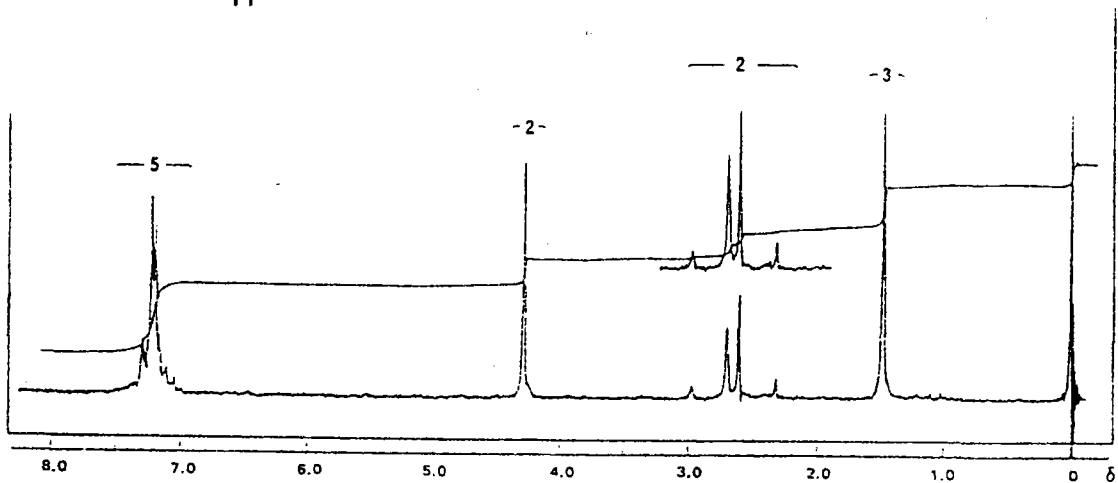
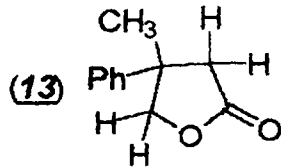
[8 markah]

6. (b) Terdapat satu penggeseran (anjakan) batokromik apabila suatu sebatian (**12**) diambil spektrum UV (ultra-lembayung)-nya dengan beberapa titik larutan natrium asetat (suatu bes sederhana). Bolehkah hakikat ini membezajelaskan antara dua struktur mungkin, (**12a**) atau (**12b**), bagi (**12**)? Jelaskan.

**(12a)****(12b)**

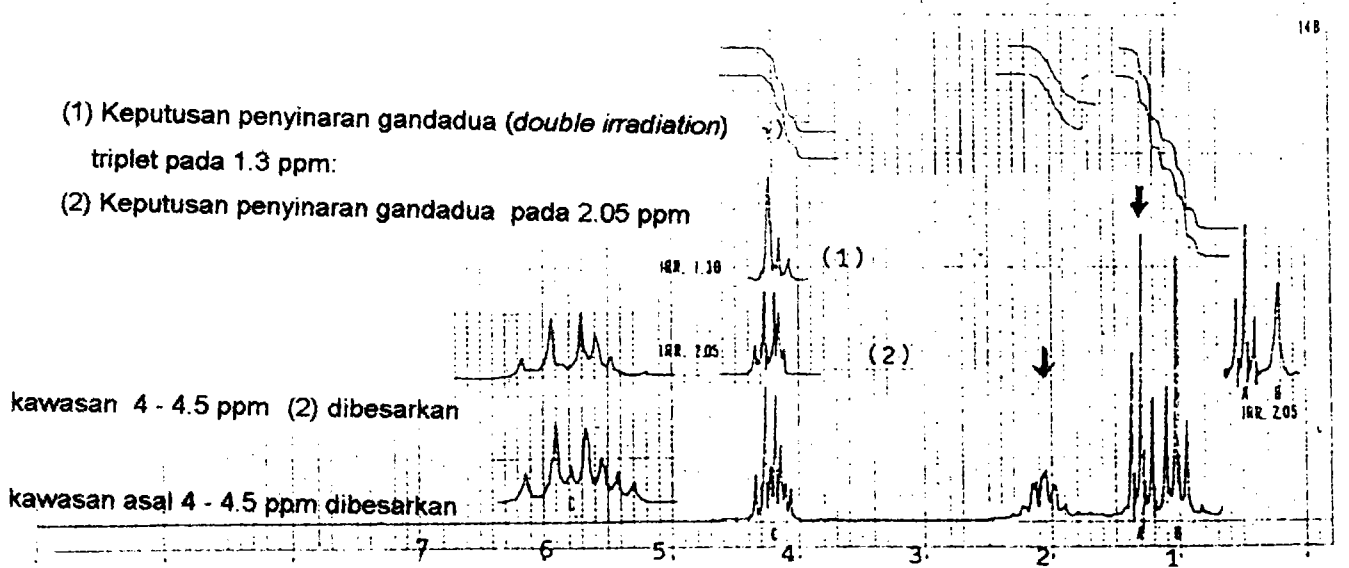
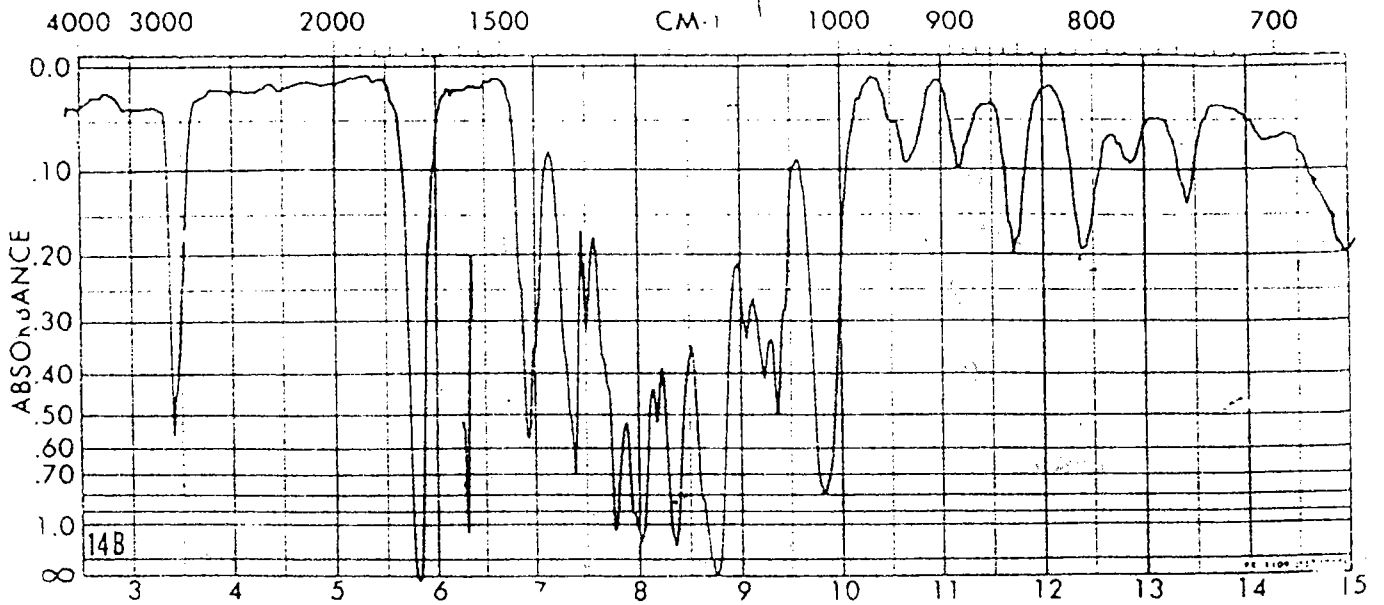
[6 markah]

- (c) Spektrum proton NMR bagi β -metil- β -fenil- γ -butirolakton (**13**) diberikan di bawah ini. Jelaskan kenapa terdapatnya satu sistem AB dan bukan satu jangkakan singlet 2H yang dipusatkan pada 2.7 ppm.

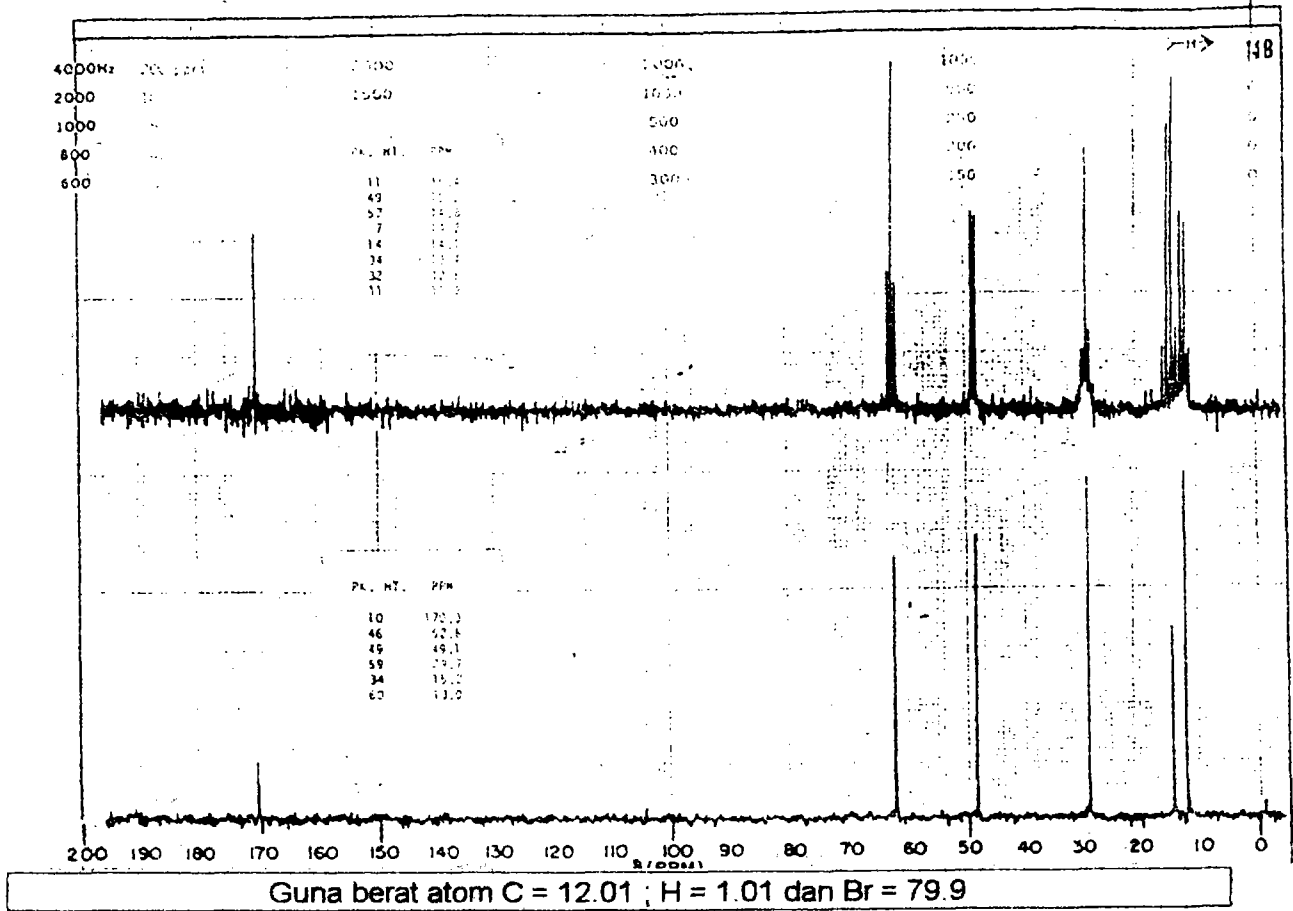


[6 markah]

7. Kenalpastikan struktur bagi sebatian (dijumpai C 39.9%; H 5.7%; Br 41.0%) yang spektrum-spektrum diberikan di bawah ini:



7. sambungan - spektrum ¹³C



[20 markah]

