

PROUČAVANJE VODONIČNE VEZE NMR SPEKTROSKOPIJOM

Savremena definicija vodonične veze (Pimentela i MekLelana) kaže da vodonična veza [D-H...A] postoji između funkcionalne grupe D-H (D - donor) i atoma ili grupe atoma A (akceptor) u istom ili nekom drugom molekulu ukoliko:

- postoji dokaz da je formirana veza (asocijacija ili je obrazovanje heliksa) i
- postoji dokaz da se ova veza koja povezuje D-H i A ostvaruje preko atoma vodonika koji je već vezan za D.

Građenje vodonične veze dovodi do promena u IC i NMR spektrima jedinjenja, pa se IC i NMR spektroskopija koriste za praćenje formiranja i određivanje jačine vodonične veze.

NMR spektroskopija je metoda strukturne analize koja se zasniva na orijentaciji nuklearnih magnetnih momenata u jakom homogenom magnetnom polju. Pri tome se razmenjuje mala energija koja odgovara radiotalasnom zračenju (RF). NMR spektar je niz rezonantnih otklona tj. zavisnost inteziteta na osi frekvencija primenjenog RF polja ili njoj srazmerne bezdimenzionalne veličine - hemijskog pomaka. Primena NMR-a u fizičko-hemijskoj analizi se zasniva na tri parametra:

- hemijskom pomaku (identifikaciji funkcionalnih grupa)
- cepanju pikova (raspored funkcionalnih grupa u molekulu)
- površini pika (broj jezgara u funkcionalnoj grupi).

Pouzdana identifikacija vodonične veze može se dobiti na osnovu protonskog NMR spektra. Protoni vezani vodoničnom vezom imaju veći hemijski pomak od istih protona u slobodnom obliku. Veličina ovog pomaka zavisi od koncentracije jedinjenja koje gradi vodoničnu vezu u slučaju intermolekulske vodonične veze, dok je nezavisna od koncentracije kod jedinjenja koja grade intramolekulsku vodoničnu vezu.

ZADATAK

- Napraviti po 50 ml rastvora propanola u CCl_4 sledećih zapreminskih udela propanola: 10, 25, 50 i 100%.
- Snimiti NMR sprektre napravljenih rastvora.
- Na osnovu dobijenih spektara i određenih vrednosti hemijskih pomaka identifikovati koncentracije rastvora.
- Popuniti tabelu:

Broj rastvora	Zapremiski udeo propanola	Vrednost hemijskog pomaka δ
1		
2		
3		
4		

- Objasniti uočeno ponašanje pika protona vezanog vodoničnom vezom
- Koji tip vodonične veze se formira?