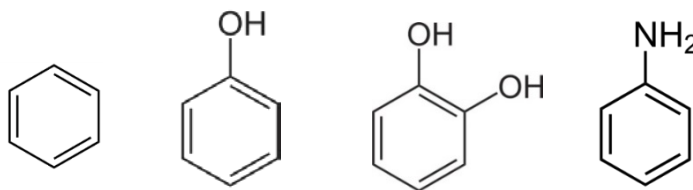


Vežba 2.2.**UTICAJ POLARNOSTI RASTVARAČA I STRUKTURE MOLEKULA NA POLOŽAJ I OBLIK ELEKTRONSKIH TRAKA $\pi \rightarrow \pi^*$ PRELAZA U SPEKTRIMA AROMATIČNIH JEDINJENJA****Kraće teorijske osnove i zadatak vežbe**

Benzen predstavlja osnovni, roditeljski, molekul u klasi aromatičnih jedinjenja sa veoma specifičnim osobinama i spektrohemijskim ponašanjem. Tri tipa spektralnih prelaza u molekulu benzena su od ključnog značaja za celokupnu spektrohemijsku aromatičnih karbocikličnih π elektronskih sistema jer se javljaju u skoro svim spektrima ove klase jedinjenja. Najintenzivnija traka u spektru je tzv. II primarna, β , traka koja nije od posebno velikog značaja s obzirom da se javlja u vakuumskoj ULj oblasti i kao takva ne vidi u spektru. Primarna, ρ , traka posledica je simetrijski zabranjenog prelaza i javlja se na granici vakuumske i vazdušne ULj oblasti. Sekundarna, α , traka ($\lambda \approx 260$ nm) je veoma specifična, sa dobro definisanom vibracionom strukturom koja je karakteristična i za spektre drugih aromata. Vibraciona struktura sekundarne trake je manje izražena u polarnim rastvaračima u odnosu na nepolarne rastvarače i spektre para. Sekundarna traka pod uticajem rastvarača i supstituenata može menjati oblik, položaj i intenzitet. Ova traka se često naziva i benzoidna traka. Sekundarna traka je malog intenziteta i nastaje kao posledica narušavanja simetrijske zabrane prelaza usled vibracija koje vrše deformaciju prstena.

Zadatak vežbe je da se analiziraju uticaj rastvarača i priroda supstituenata na energiju i oblik traka $\pi \rightarrow \pi^*$ prelaza u spektrima benzena i nekih njegovih derivata (slika 2.2.)



Slika 2.2. Strukture benzena, fenola, katehola i anilina (s leva na desno)

Instrumenti

Registrujući ULJ-VID spektrofotometar, kvarcne kivete dužine optičkog puta $d = 10$ mm.

Hemikalije

Benzen, fenol, katehol (1,2-dihidroksibenzen), anilin, n-heksan (cikloheksan), etanol, natrijum hidroksid, hlorovodonična kiselina.

Postupak

a) Napraviti 10 ml rastvora benzena u n-heksanu (ili cikloheksanu) i etanolu, približne koncentracije $c \sim 5 \times 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ ($M = 78 \text{ g mol}^{-1}$; $\rho = 0,88 \text{ g cm}^{-3}$). Snimiti apsorpcione spektre rastvora u oblasti od 200-400 nm.

b) Napraviti 10 ml rastvora fenola u n-heksanu i etanolu približne koncentracije $c \sim 5 \times 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ ($M = 94 \text{ g mol}^{-1}$; $\rho = 1,071 \text{ g cm}^{-3}$). Snimiti apsorpcione spektre rastvora u oblasti od 200-400 nm.

c) Napraviti 10 ml rastvora katehola u n-heksanu i etanolu približne koncentracije $c \sim 5 \times 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ ($M = 110,1 \text{ g mol}^{-1}$). Snimiti apsorpcione spektre rastvora u oblasti od 200-400 nm.

d) Napraviti 10 ml rastvora anilina u n-heksanu i etanolu približne koncentracije $c \sim 5 \times 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ ($M = 93,1 \text{ g mol}^{-1}$). Snimiti apsorpcione spektre rastvora u oblasti od 200-400 nm.

e) U kivete u kojima se nalaze pripremljeni rastvor fenola u etanolu i čist etanol (rastvarač) dodati po jednu kap rastvora NaOH u vodi ($c = 1 \text{ mol dm}^{-3}$) i snimiti apsorpcioni spektar u istoj oblasti.

f) U kivete u kojima se nalaze pripremljeni rastvor katehola u etanolu i čist etanol (rastvarač) dodati po jednu kap rastvora NaOH u vodi ($c = 1 \text{ mol dm}^{-3}$) i snimiti apsorpcioni spektar u istoj oblasti.

g) U kivete u kojima se nalaze pripremljeni rastvor anilina u etanolu i čist etanol (rastvarač) dodati po jednu do dve kapi rastvora HCl u vodi ($c = 1 \text{ mol dm}^{-3}$) i snimiti apsorpcioni spektar u istoj oblasti.

Prikaz rezultata merenja i diskusija

1. Sa spektara očitati položaje apsorpcionih maksimuma primarne i sekundarne trake, vrednosti apsorbanacija maksimuma i vrednosti molarnih apsorpcionih koeficijenata. Rezultate prikazati tabelarno ($\lambda_{\text{max } 1}$, $\lambda_{\text{max } 2}$; A_1 , A_2 ; a_1 , a_2). Kod sekundarne trake uneti vrednosti A i a koje odgovaraju najintenzivnijem maksimumu vibracione strukture date trake.

2. Na osnovu izgleda uporedo snimljenih spektara uporediti vrednosti λ_{max} i a apsorpcionih maksimuma primarne ($\lambda \sim 200 \text{ nm}$) i sekundarne ($\lambda \sim 260 \text{ nm}$) trake u spektrima benzena, fenola, katehola i anilina u n-heksanu (cikloheksanu) kao rastvaraču.

3. Uporediti vrednosti λ_{max} i a sekundarne trake u spektrima fenola u n-heksanu (cikloheksanu) i etanolu.

4. Uporediti vrednosti λ_{max} i a sekundarne trake u spektrima katehola u n-heksanu (cikloheksanu) i etanolu.

5. Uporediti vrednosti λ_{max} i a sekundarne trake u spektrima anilina u n-heksanu (cikloheksanu) i etanolu.

6. Prodiskutovati promene na spektrima rastvora fenola i katehola pri dodatku NaOH i spektru anilina pri dodatku HCl.

7. Prodiskutovati vibracionu strukturu sekundarne trake u spektrima rastvora benzena, fenola, katehola i anilina u etanolu i n-heksanu (cikloheksanu).

IZVEŠTAJ

Apsorpcioni spektri benzena, fenola, katehola i anilina u n-heksanu (cikloheksanu)

Apsorpcioni spektri benzena, fenola, katehola i anilina u etanolu

Apsorpcioni spektri fenola i katehola u etanolu uz dodatak NaOH

Apsorpcioni spektar anilina u etanolu uz dodatak HCl

Tabela 2.4. Položaji apsorpcionih maksimuma primarne i sekundarne trake, vrednosti apsorbancija maksimuma i molarnih apsorpcionih koeficijenata

Jedinjenje	Rastvarač	λ_1^p (nm) (prim. traka)	λ_2^a (nm) (sek. traka)	A_1^p (prim. traka)	A_2^a (sek. traka)	$a^p \times 10^4$ ($\text{dm}^2 \text{mol}^{-1}$) (prim. traka)	$a^a \times 10^4$ ($\text{dm}^2 \text{mol}^{-1}$) (sek. traka)
benzen	n-heksan (cikloheksan)						
fenol							
katehol							
anilin							
benzen	etanol						
fenol							
katehol							
anilin							
fenol + NaOH	etanol						
katehol + NaOH							
anilin + HCl							

Diskusija