

Vežba 2.3.

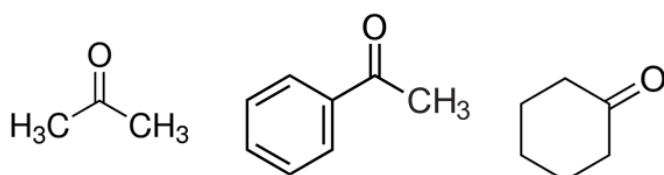
UTICAJ POLARNOSTI RASTVARAČA I STRUKTURE MOLEKULA NA POLOŽAJ I OBLIK ELEKTRONSKIH TRAKA $n \rightarrow \pi^*$ PRELAZA U SPEKTRIMA KARBONILNIH JEDINJENJA

Kraće teorijske osnove i zadatak vežbe

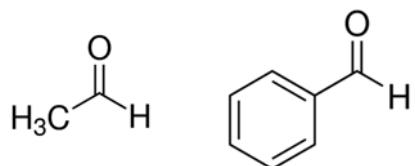
Solvatochromija je najopštiji pojam koji definiše uticaj medijuma (tečnosti ili čvrste supstance) na karakteristike elektronskih apsorpcionih i emisionih spektara molekula. Solvatochromija je nešto uži pojam koji definiše uticaj rastvorak-rastvarač interakcija na karakteristike elektronskih apsorpcionih i emisionih spektrara molekula. Solvatochromni efekat se može manifestovati na više načina, kao promena položaja (λ) apsorpcionog (emisionog) maksimuma, kao promena širine, promena intenziteta (hipo- ili hiper- hromija) i/ili promena oblika apsorpcionih ili emisionih traka molekula u rastvorima. Priroda uticaja rastvarača je višestruka. Rastvarač može da deluje hemijski ili kvazi hemijski a rastvorak i svojim fizičkim osobinama (dielektrična konstanta, indeks prelamanja).

U spektrima karbonilnih jedinjenja pored trake $\pi \rightarrow \pi^*$ prelaza javlja se i traka slabog intenziteta koja potiče od $n \rightarrow \pi^*$ prelaza unutar karbonilne funkcionalne grupe. Položaj trake $n \rightarrow \pi^*$ prelaza zavisi od elektronskih osobina supstituenata koji se uvode u jedinjenje kao i od osobina rastvarača. Efekat auksochromnih supstituenata koji se nalaze neposredno uz hromofor, praćen promenom rastvarača od ugljovodoničnih do hidroksilovanih, prouzrokuje hipsochromno pomeranje trake $n \rightarrow \pi^*$ prelaza.

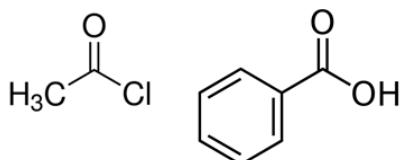
Zadatak vežbe je da se ispita uticaj različitih supstituenata i polarnosti rastvarača na energiju $n \rightarrow \pi^*$ prelaza u nizu karbonilnih jedinjenja (slike 2.3. - 2.5.).



Slika 2.3. Strukture acetona, acetofenona i cikloheksanona (s leva na desno)



Slika 2.4. Strukture acetaldehida i benzaldehida (s leva na desno)



Slika 2.5. Strukture acetilchlorida i benzojeve kiseline (s leva na desno)

Instrumenti

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

Hemikalije

Ketoni (aceton, acetofenon, cikloheksanon), aldehidi (acetaldehid, benzaldehid), hloridi kiselina (acetilhlorid), karboksilne kiseline (benzojeva kiselina), n-heksan (cikloheksan), hloroform, etanol i voda.

Postupak

- Napraviti rastvore acetona, koncentracije $c \sim 5 \times 10^{-2}$ mol dm⁻³, u vodi, etanolu, hloroformu i n-heksanu (cikloheksanu).

- b) Snimiti apsorpcione spektre rastvora pod a) u oblasti od 200-350 nm. Spektre prikazati uporedo.
- c) Napraviti rastvore acetofenona ($c \sim 3 \times 10^{-2}$ mol dm $^{-3}$), cikloheksanona ($c \sim 3 \times 10^{-2}$ mol dm $^{-3}$), acetaldehida ($c \sim 3 \times 10^{-2}$ mol dm $^{-3}$), benzaldehida ($c \sim 3 \times 10^{-2}$ mol dm $^{-3}$), acetilhlorida ($c \sim 3 \times 10^{-2}$ mol dm $^{-3}$) i benzojeve kiseline ($c \sim 3 \times 10^{-2}$ mol dm $^{-3}$) u n-heksanu (cikloheksanu). Ukoliko intenzitet trake $n \rightarrow \pi^*$ prelaza nije odgovarajući korigovati koncentraciju rastvora ili dužinu optičkog puta.
- d) Snimiti apsorpcione spektre rastvora pod b) u oblasti od 200-350 nm. Spektre prikazati uporedo.

Prikaz rezultata merenja i diskusija

1. Tabelarno prikazati položaj maksimuma trake $n \rightarrow \pi^*$ prelaza molekula acetona u seriji rastvarača. Objasniti promene koje nastaju kao posledica različite polarnosti rastvarača.
2. Tabelarno prikazati položaj maksimuma trake $n \rightarrow \pi^*$ prelaza u spektrima rastvora pod c) u n-heksanu (cikloheksanu). Dobijene rezultate povezati sa strukturom molekula i elektronskim osobinama supstituenata.

I Z V E Š T A J

Apsorpcioni spektri acetona u n-heksanu, hloroformu, etanolu i vodi

Apsorpcioni spektri acetona, acetofenona i cikloheksanona u n-heksanu

Apsorpcioni spektri acetona, acetaldehyda i benzaldehyda n-heksanu

Apsorpcioni spektri acetona, acetilhlorida i benzojeve kiseline n-heksanu

Tabela 2.5. Položaj maksimuma trake $n \rightarrow \pi^*$ prelaza molekula acetona u seriji rastvarača

| Rastvarač | $\lambda_{\max} (n \rightarrow \pi^*)$ (nm) | n $\rightarrow \pi^*$ traka | |
|---------------------------|--|-----------------------------|---|
| | | A | $a \times 10^4$ (cm 2 mol $^{-1}$) |
| n-heksan (cikloheksan) | | | |
| hloroform | | | |
| etanol | | | |
| voda | | | |

Tabela 2.6. Položaj maksimuma trake $n \rightarrow \pi^*$ prelaza molekula karbonilnih jedinjenja u n-heksanu (cikloheksanu)

| Rastvorak | $\lambda_{\max} (n \rightarrow \pi^*)$ (nm) | n $\rightarrow \pi^*$ traka | |
|--------------------|--|-----------------------------|---|
| | | A | $a \times 10^4$ (cm 2 mol $^{-1}$) |
| aceton | | | |
| acetofenon | | | |
| cikloheksanon | | | |
| benzojeva kiselina | | | |
| acetilhlorid | | | |
| acetaldehid | | | |
| benzaldehid | | | |

Diskusija

