

## <sup>1</sup>H NMR İLE KALİTATİF ANALİZ-2

### IR ve <sup>1</sup>H NMR ile Yapı Tayini

Ref. e-makaleleri, Enstrümantal Analiz,

<sup>1</sup>H NMR ile Yapı Tayini

Molekül formülü bilinen bir bileşiğin yapısal formülünün bulunmasında:

1. Öncelikle bileşikteki doymamışlık derecesinin saptanması IR ve NMR spektrum verilerinin değerlendirilmesini kolaylaştırır. Doymamışlık derecesi aşağıdaki eşitlikle hesaplanır:

$C_cH_hN_nO_oX_x$

$$\text{doymamışlık derecesi, DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2}$$

1 doymamış: 1C=C, 1C=O veya 1 halka

2 doymamış: 2 C=C, 2 halka, veya C≡C, veya C=C ve halkalar kombinasyonu

3 doymamış: çift bağ, üçlü bağ, halkalar kombinasyonu

4 doymamış: tipik olarak aromatik halkayı gösterir

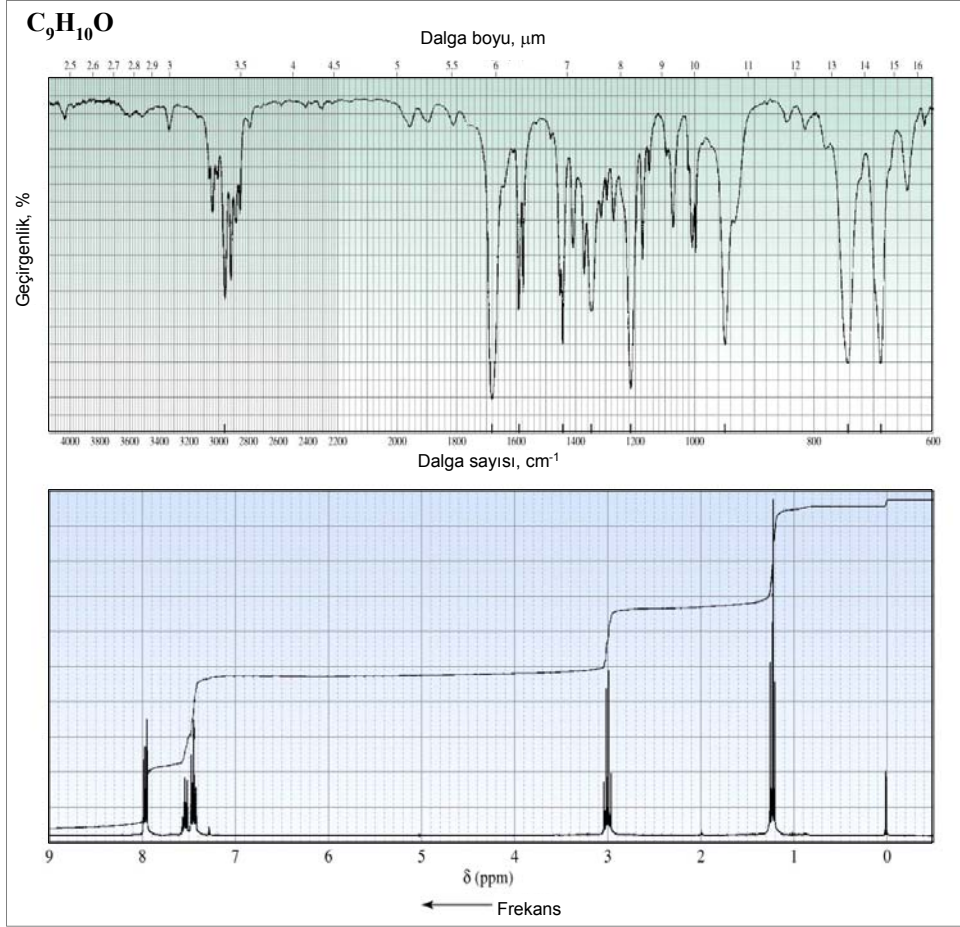
2. IR spektrumdaki karakteristik piklerin dalga sayıları spektrumdaki skaladan okunarak kaydedilir ve moleküler hareketlere göre sınıflandırılır. (Tablo-2)

3. Verilen NMR spektrumdaki piklerin yaklaşık integral değerleri spektrumdan saptanır ve kaydedilir, pik bölünme paternleri değerlendirilerek bileşiğin içerdiği gruptaki proton sayıları saptanır. (Tablo-1)

Sonuç: Elde edilen bilgiler bir araya getirilerek bileşiğin yapısı çıkarılır.

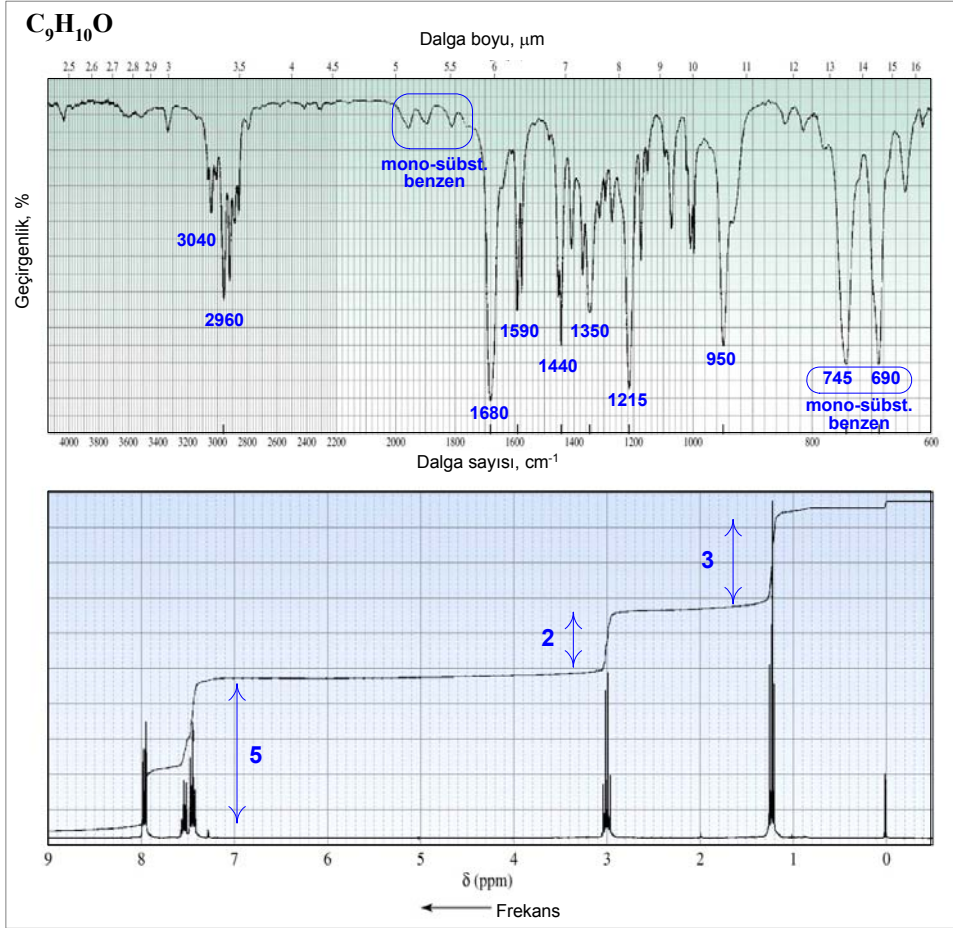
**ÖRNEK. 1**

Molekül formülü  $C_9H_{10}O$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 9 + 2) - (10)}{2} = 5$$

Doymamış 5 birim vardır; 5 doymamışlık, halkalar ve/veya pi bağları gösterir.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
aromatik	C–H gerilme	3040
alifatik	C–H gerilme	2960
aromatik, overtone	mono- sübstitüston	2000-1650
keton	–C=O gerilme,	1680
keton	C–C gerilme	1215
aromatik	C–H mono-sübst.	745, 690

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

IR verilere göre madde bir mono sübstitüe aromatik keton olabilir.

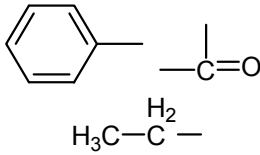
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	* $\delta$ , ppm	*integral	H sayısı	grup	
aromatik grup	8-7.5	5	5H	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> –R
kuartet	3	2	2H	CH <sub>2</sub>	O–C–CH <sub>2</sub> – CH <sub>3</sub>
triplet	1.3	3	3H	CH <sub>3</sub>	–CH <sub>2</sub> –CH <sub>3</sub>

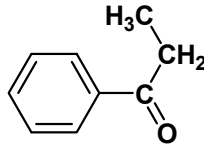
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O

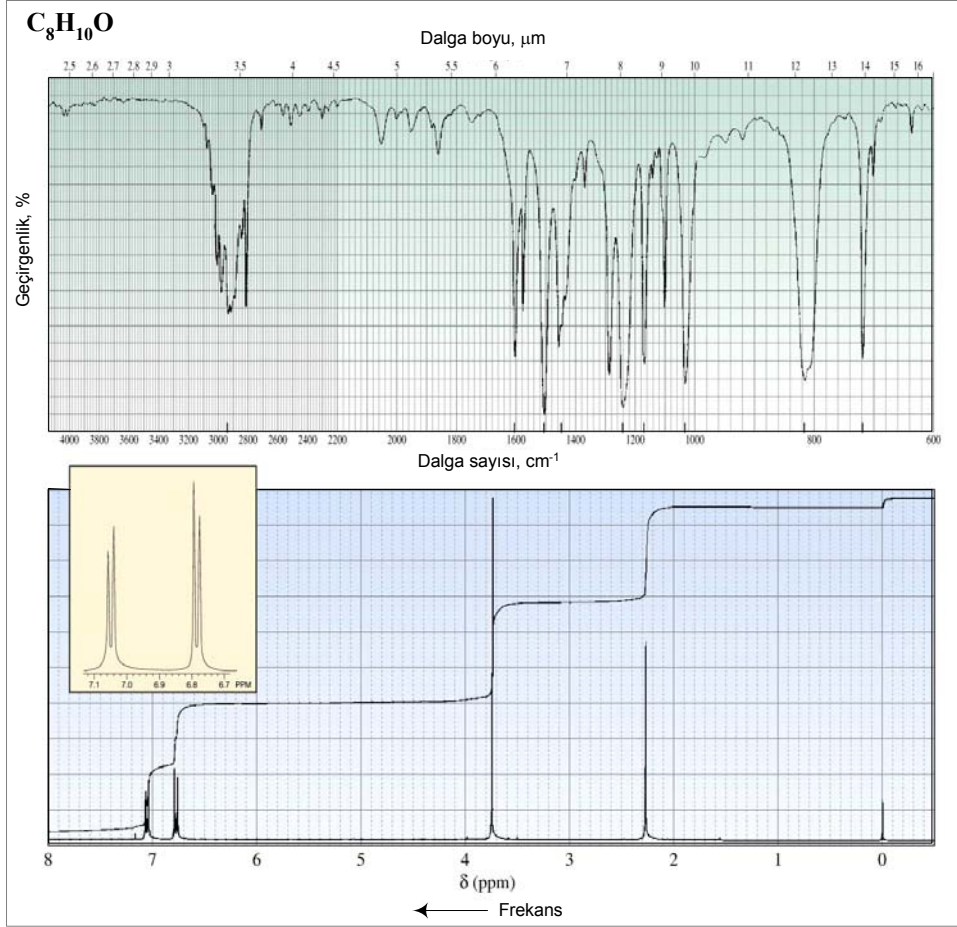


C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>COCH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>

propiofenon  
(1-fenil-1-propanon;  
etil fenil keton)

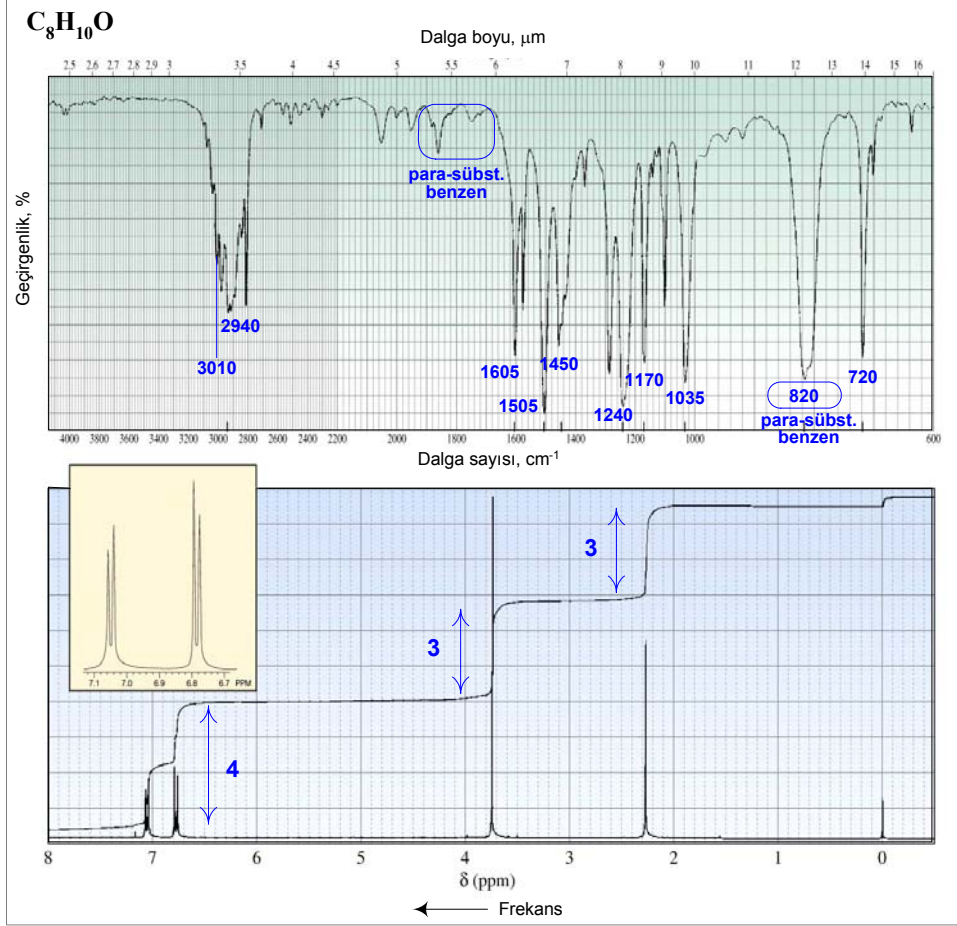
**ÖRNEK. 2**

Molekül formülü  $C_9H_{10}O$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 8 + 2) - (10)}{2} = 4$$

Doymamış dört birim vardır; 4 birim tipik olarak aromatik halkayı gösterir.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
metoksi (CH <sub>3</sub> -O-)	C-H gerilme,	2810
aromatik, overtone	para- sübstitüston	2000-1650
aromatik eter	aril-O stretch	1230
alkil sübst. eter	C-O gerilme	1170
aromatik	C-H para-sübst.	820

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

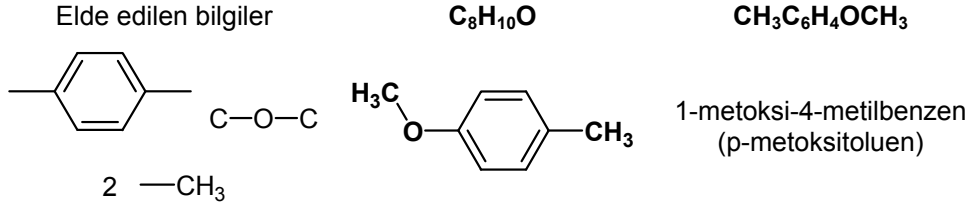
IR verilere göre madde bir para sübstitüe aromatik eter olabilir.

## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	* $\delta$ , ppm	*integral	H sayısı	grup	
aromatik grup	6.7-7.1	4	4H	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	O-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -R
singlet	3.8	3	3H	CH <sub>3</sub>	O-CH <sub>3</sub>
singlet	2.2	3	3H	CH <sub>3</sub>	C-CH <sub>3</sub>

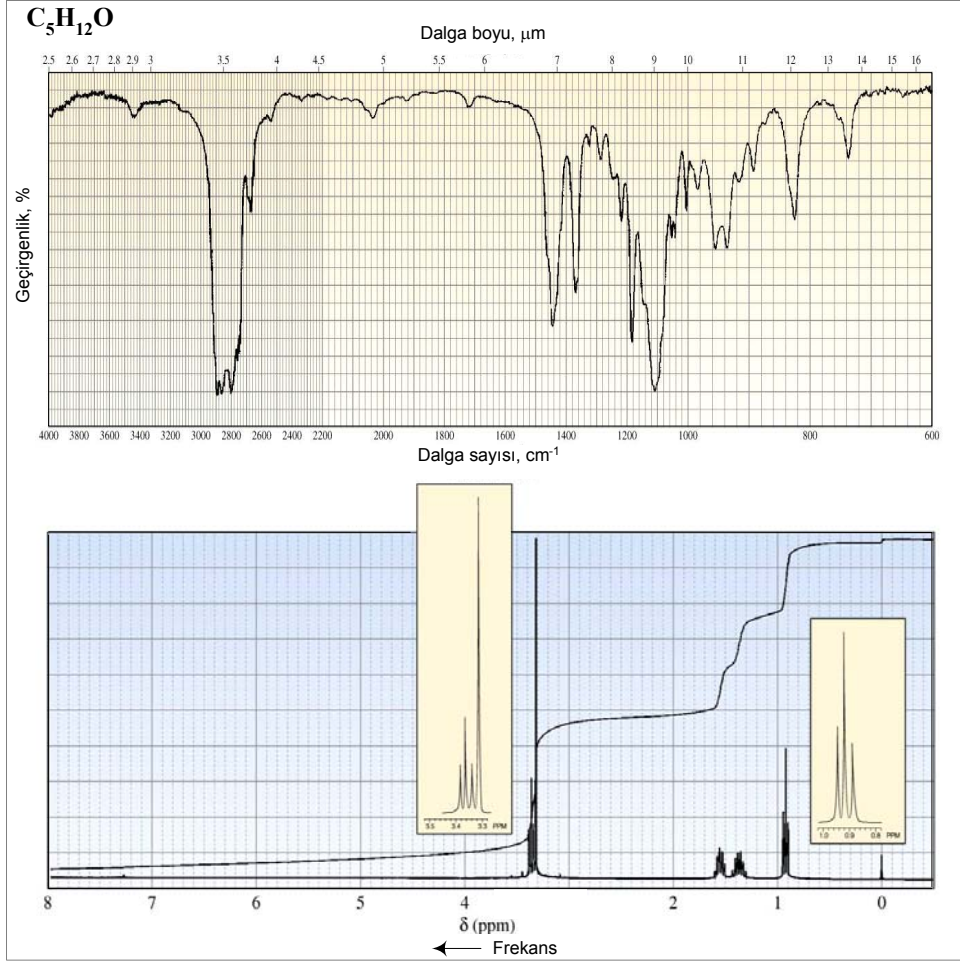
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ



**ÖRNEK. 3**

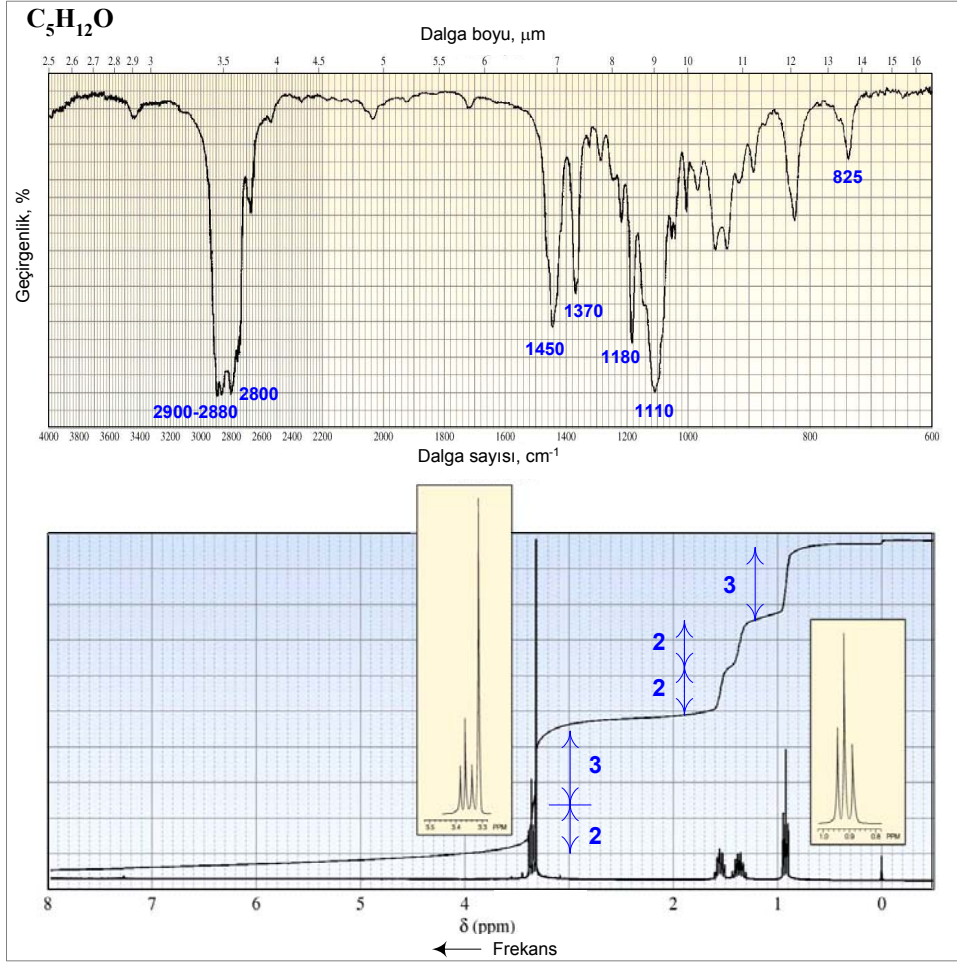
Molekül formülü  $C_5H_{10}O$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?





## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>O

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 5 + 2) - (12)}{2} = 0 \quad \text{Doymamış yoktur.}$$

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
alkil	C-H Stretc	2900-2880
metoksi (CH <sub>3</sub> -O-)	C-H gerilme,	2800
alkil	C-C (..-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -..)	1450
alkil	C-C (..-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub> )	1370
eter (dialkil)	C-O-C gerilme	1180
alkil sübst. eter	C-O stretch	1110

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

IR verilere göre madde bir alifatik eter olabilir.

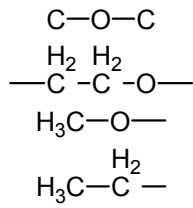
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	*δ, ppm	*integral	H sayısı	grup	
triplet	3.3	2	2H	CH <sub>2</sub>	O-CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> -
singlet	3.2	3	3H	CH <sub>3</sub>	O-CH <sub>3</sub>
triplet-triplet	1.7	2	2H	CH <sub>2</sub>	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
kuartet-triplet	1.4	2	2H	CH <sub>2</sub>	
triplet	0.9	3	3H	CH <sub>3</sub>	

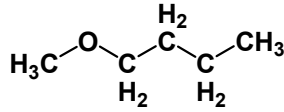
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>O

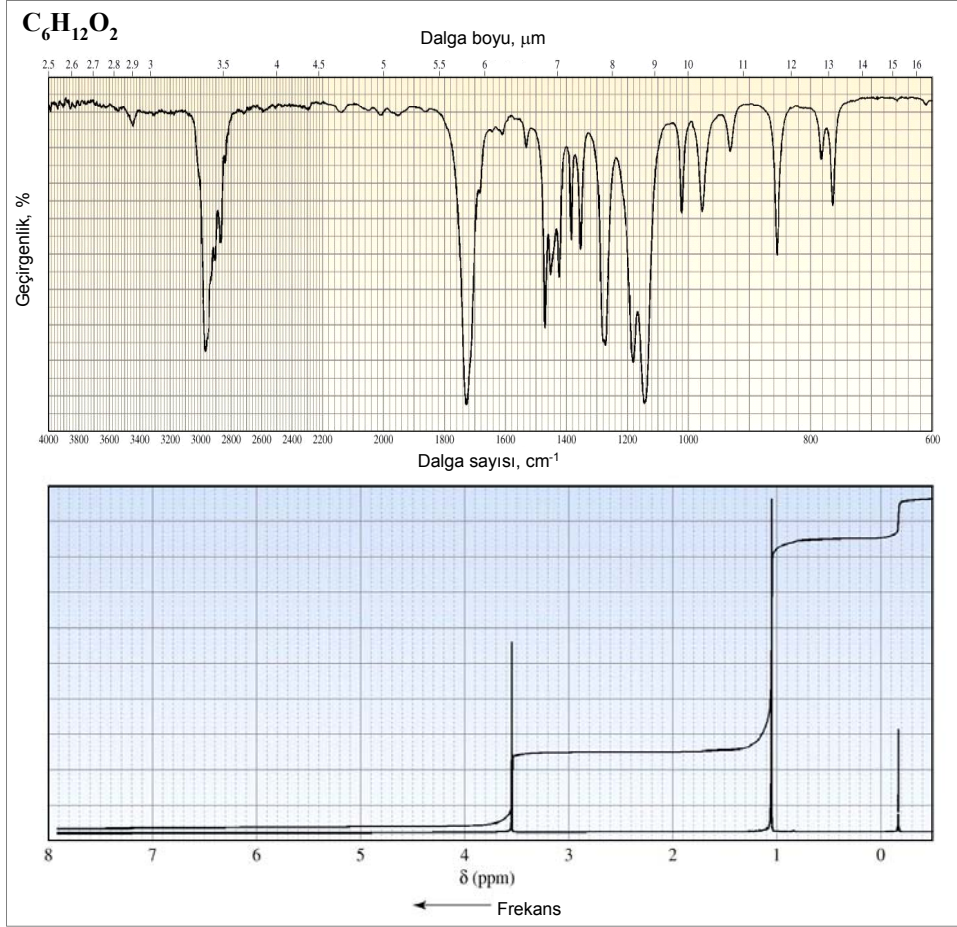


CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>

bütül metil eter  
1-metoksibütan

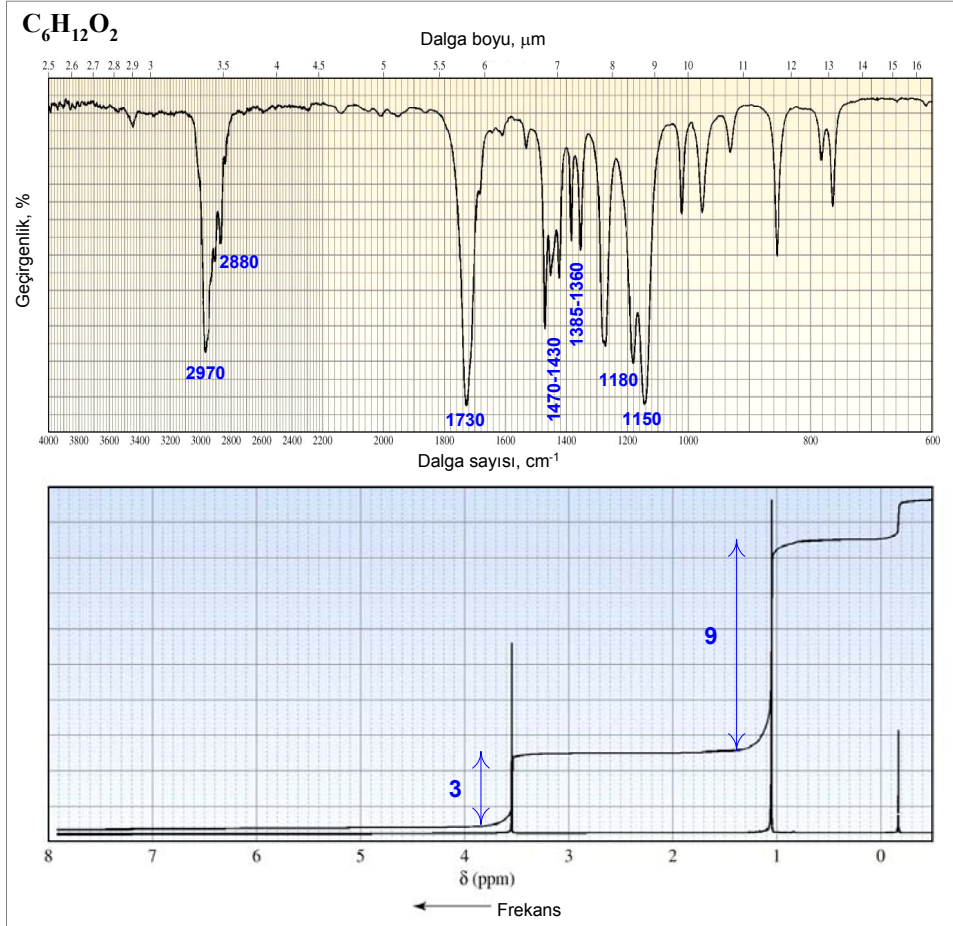
**ÖRNEK. 4**

Molekül formülü  $C_9H_{10}O$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 6 + 2) - (12)}{2} = 1$$

Doymamış bir birim vardır; 1 C=C, 1C = O veya 1 halka.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
alkil, CH <sub>3</sub> grup	C–H Stretch	2970-2880
ester karbonil	C=O Stretch	1730
alkil, CH <sub>3</sub> grup	CH <sub>3</sub> eğilmeler	1470-1430
alkil, CH <sub>3</sub> grup	tersiyer bütül	1385-1360
alifatik ester	C–O gerilme	1180-1150

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

IR verilere göre madde bir alifatik ester olabilir.

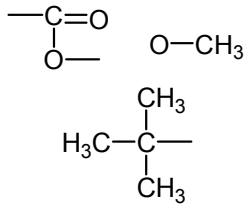
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	*δ, ppm	*integral	H sayısı	grup	
singlet	3.65	3	3H	CH <sub>3</sub>	–O–CH <sub>3</sub>
singlet	1.20	9	9H	3 CH <sub>3</sub>	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{—C—CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array}$

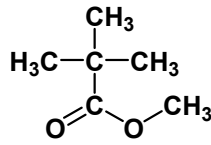
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>

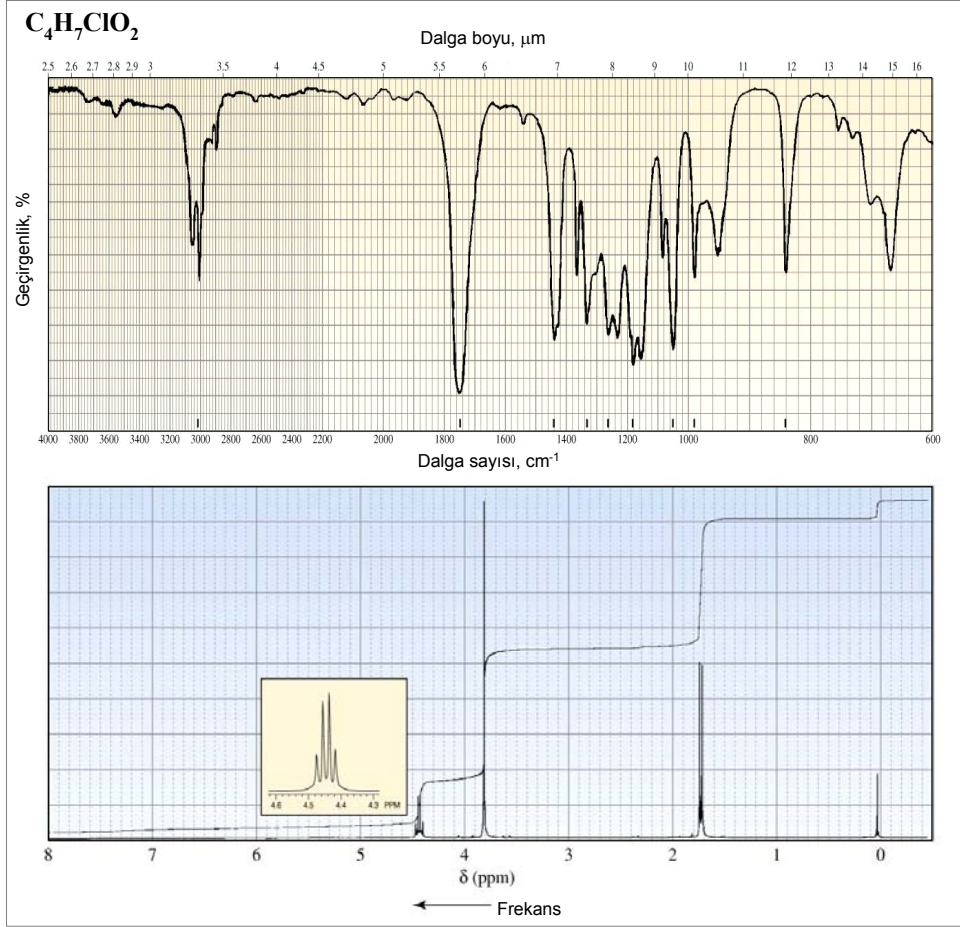


(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>CCO<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>

metil-2,2-dimetilpropanoat  
(metil pivalat)

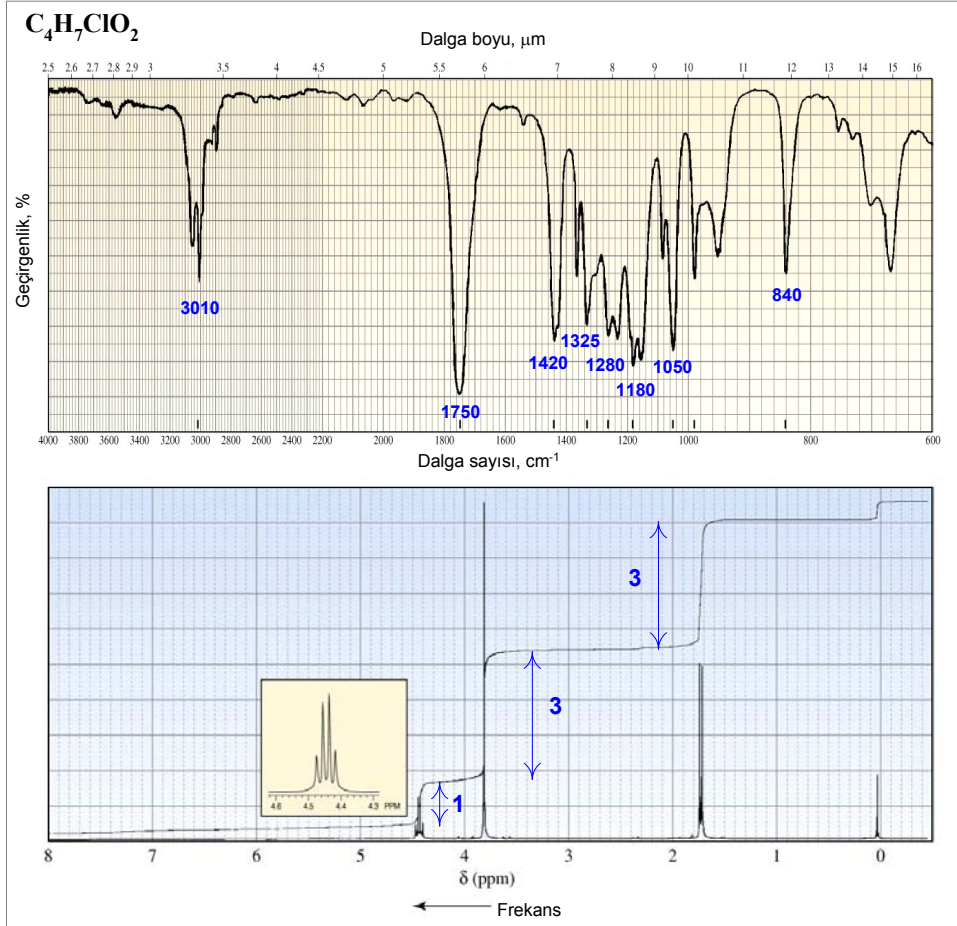
**ÖRNEK. 5**

Molekül formülü  $C_9H_{10}O$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 4 + 2) - (7 + 1)}{2} = 1$$

Doymamış bir birim vardır; 1 doymamış: 1C=C, 1C=O veya 1 halka.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
alifatik	C-H gerilme	3000
ester	C=O gerilme	1750
alifatik	CH <sub>3</sub> eğilme	1420
ester	C-O gerilme	1180
alifatik	C-Cl stretch	840

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

Doymamışlık derecesi 1 olduğuna göre, molekülde 1C=C veya 1C=O olabilir; aromatik grup yoktur. IR verilere göre molekül klorlu alifatik bir esterdir.

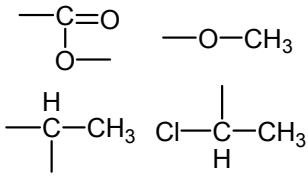
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	*δ, ppm	*integral	H sayısı	grup	
kuartet	4.5	1	1H	CH	-CH-CH <sub>3</sub>
singlet	3.8	3	3H	CH <sub>3</sub>	O-CH <sub>3</sub>
dublet	1.7	3	3H	CH <sub>3</sub>	Cl-CH-CH <sub>3</sub>

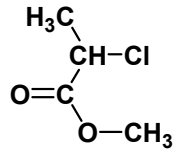
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>



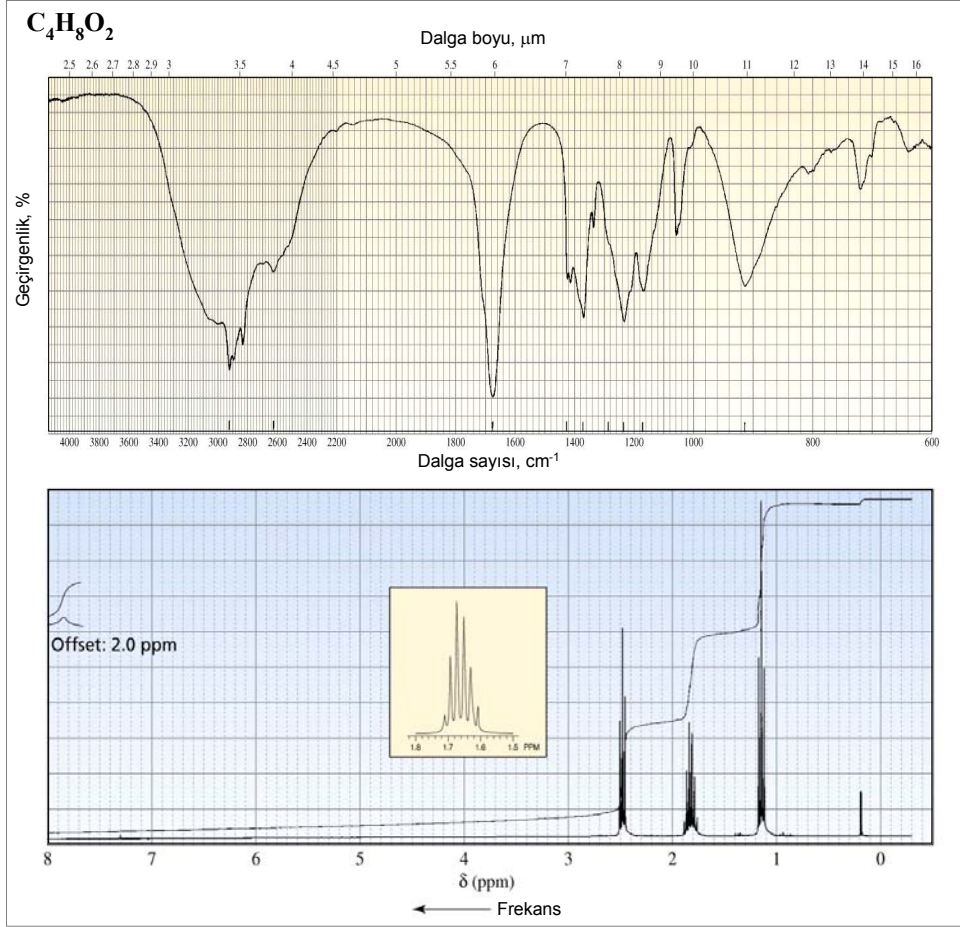
CH<sub>3</sub>CHClCOOCH<sub>3</sub>

metil-2-kloropropionat



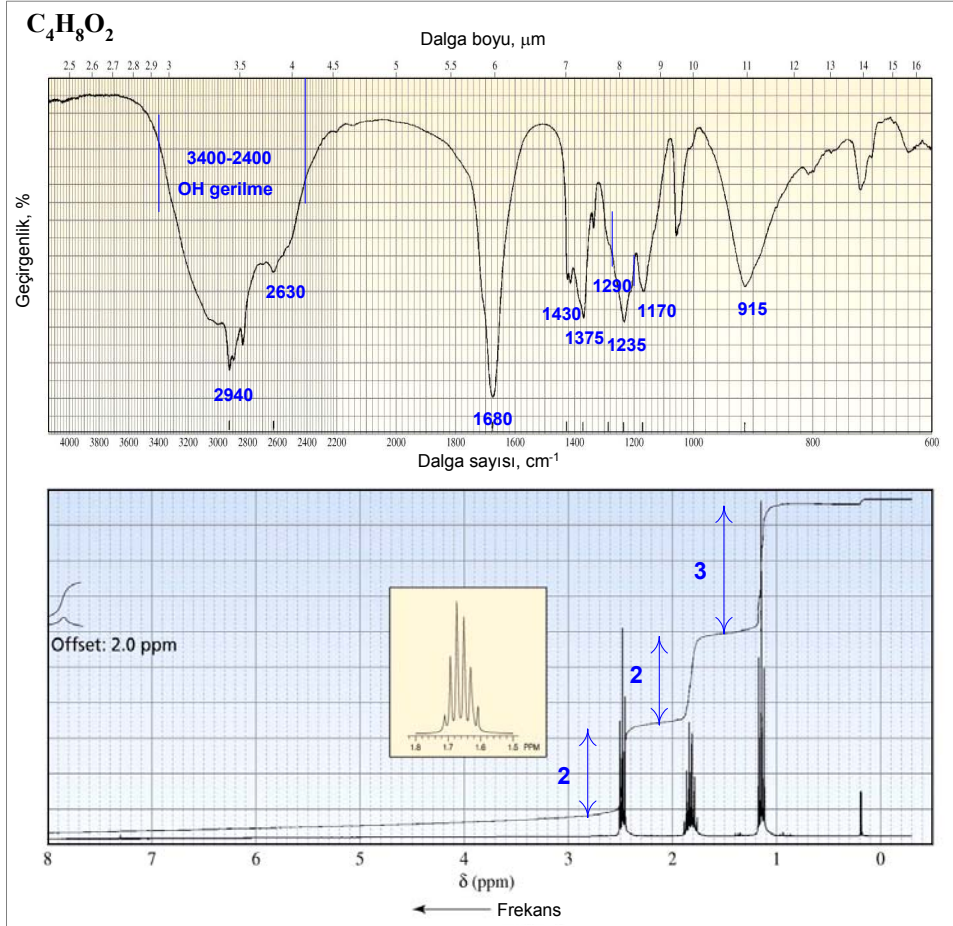
## ÖRNEK. 6

Molekül formülü  $C_4H_8O_2$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 4 + 2) - (8)}{2} = 1$$

Doymamış bir birim vardır; 1 doymamış: 1C=C, 1C=O veya 1 halka.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
karboksilik asit	O-H gerilme	3400-2400
alkan	C-H gerilme	2940
karboksilik asit	C=O gerilme	1680
karboksilik asit	O-H eğilme	1430
alkan	CH <sub>3</sub> eğilme	1375
karboksilik asit	C-O gerilme	1290

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

Doymamışlık derecesi 1 olduğuna göre, molekülde 1C=C veya 1C=O olabilir; aromatik grup yoktur. IR verilere göre molekül alifatik bir karboksilik asittir

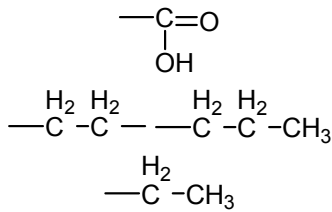
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	*δ, ppm	*integral	H sayısı	grup	
triplet	2.3	2	2H	CH <sub>2</sub>	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -
sektet	1.6	2	2H	CH <sub>2</sub>	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>
triplet	0.93	3	3H	CH <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub>

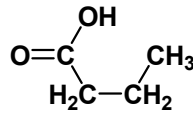
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>

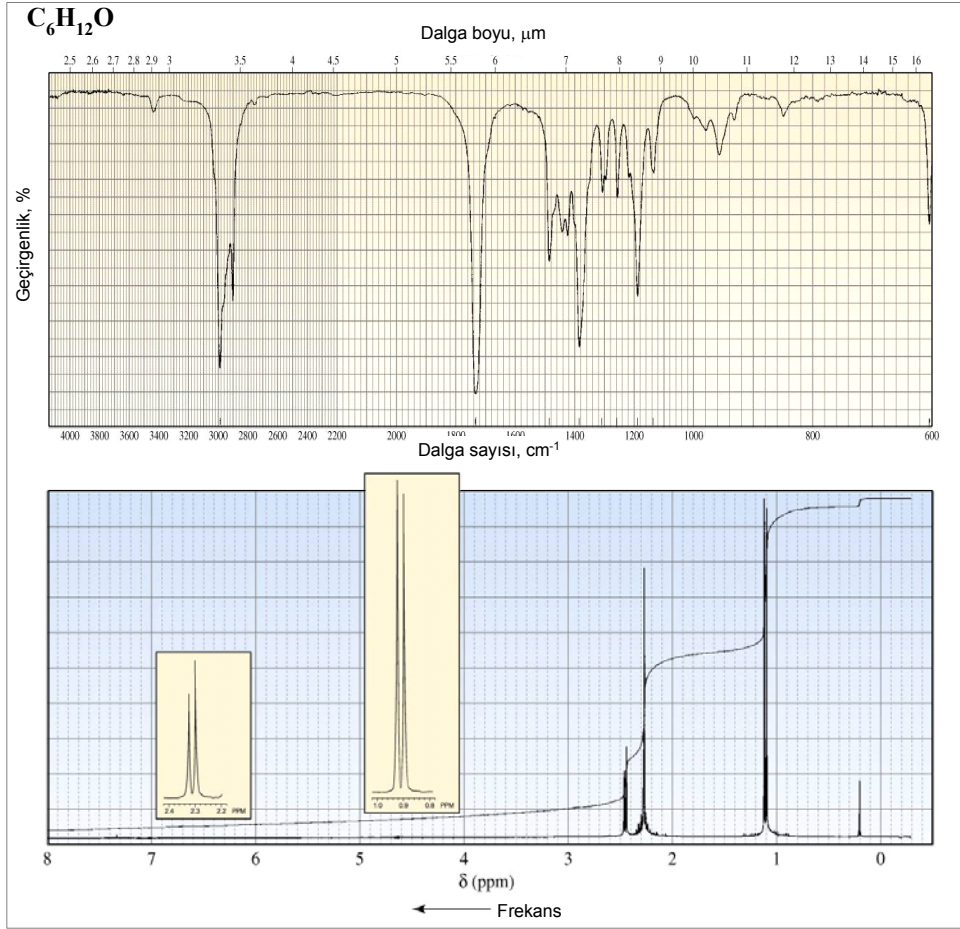


CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COOH

bütanoik asit  
(bütirik asit)

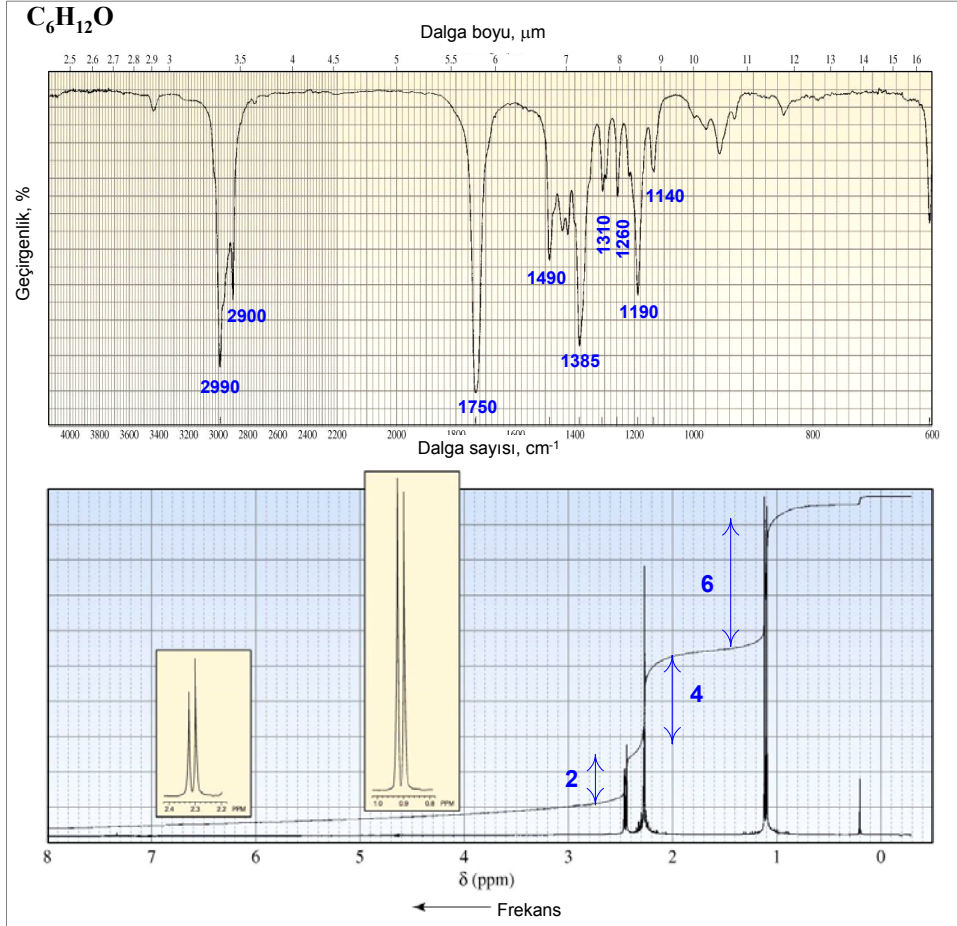
**ÖRNEK. 7**

Molekül formülü  $C_6H_{12}O$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 6 + 2) - (12)}{2} = 1$$

Doymamış bir birim vardır; 1 doymamış: 1C=C, 1C=O veya 1 halka.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
alifatik	C-H gerilme	2990-2900
keton	C=O Stretch	1750
alifatik	CH <sub>2</sub> eğilme	1490
alifatik	CH <sub>3</sub> eğilme	1385
keton	C-C gerilme	1190

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

Doymamışlık derecesi 1 olduğuna göre, molekülde 1C=C veya 1C=O olabilir; aromatik grup yoktur. IR verilere göre molekül alifatik bir ketondur.

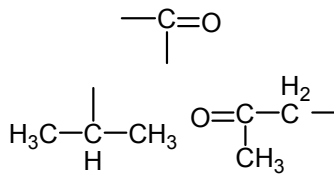
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	*δ, ppm	*integral	H sayısı	grup	
dublet	2.3	2	2H	CH <sub>2</sub>	O=C-CH <sub>2</sub> -CH
singlet	2.1	4	4H	?	? -CH <sub>3</sub> olmalı
dublet	0.9	6	6H	2CH <sub>3</sub>	-CH-CH <sub>3</sub> ve CH <sub>3</sub> -CH-

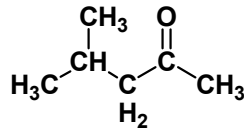
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O

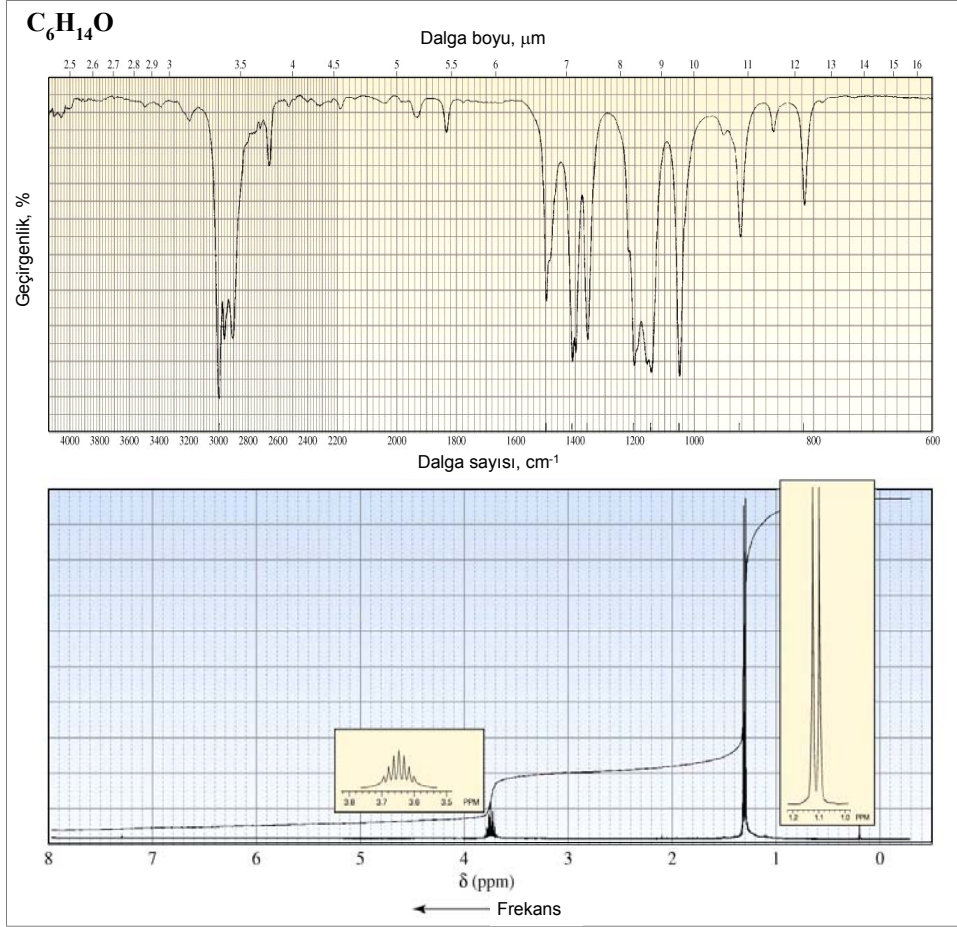


CH<sub>3</sub>COCH<sub>2</sub>CH(CH<sub>3</sub>)CH<sub>3</sub>

4-metilpentan-2-on

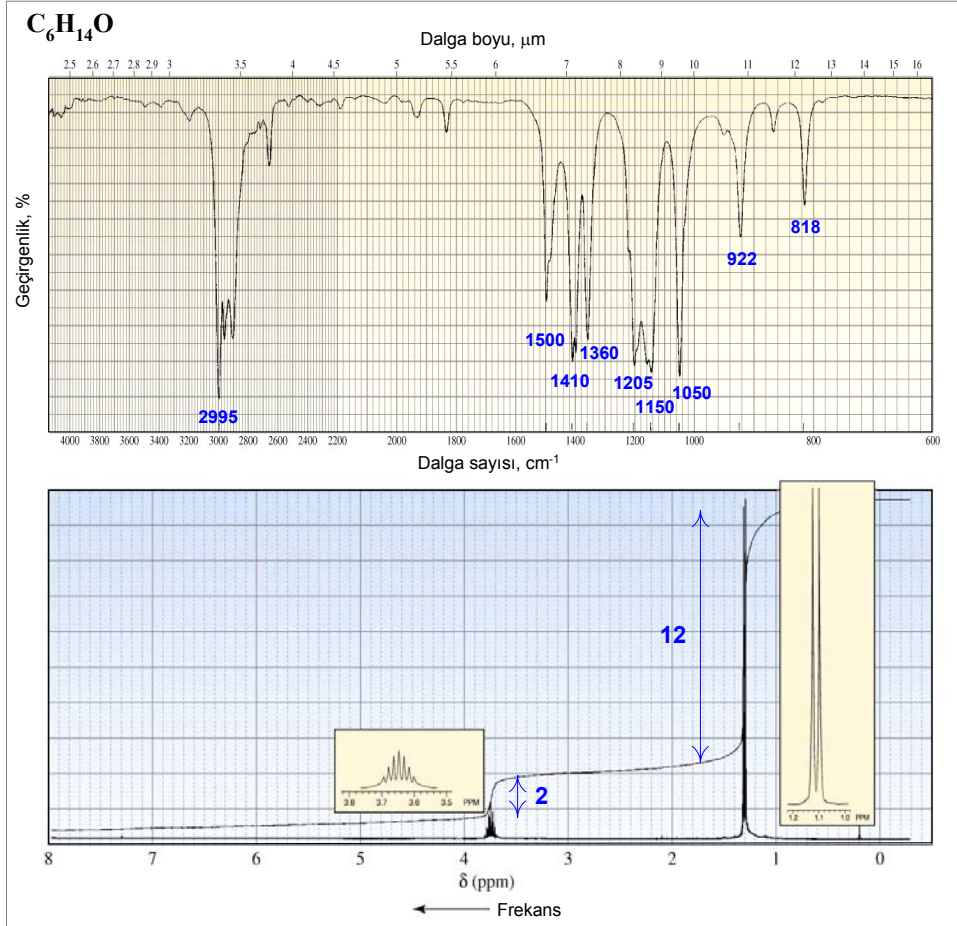
### ÖRNEK. 8

Molekül formülü  $C_6H_{14}O$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>O

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 6 + 2) - (14)}{2} = 0$$

Doymamış birim yoktur.



## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
alifatik	C-H Stretch	2995
alkan	CH <sub>3</sub> eğilme	1410, 1360
eter (dialkill)	C-O-C gerilme	1205, 1150, 1050

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

Doymamışlık derecesi 0 olduğuna göre, molekülde doymamış grup yoktur; aromatik ve karbonil grup da bulunmaz. Bu durumda formülde verilen oksijen, eter grubuna ait olabilir. IR verilere göre molekül alifatik bir eterdir.

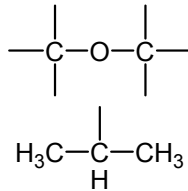
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	*δ, ppm	*integral	H sayısı	grup	
heptet	3.74	2	2H	2CH	CH <sub>3</sub> -CH-CH <sub>3</sub>
dublet	1.13	12	12H	4CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> -CH-CH <sub>3</sub>

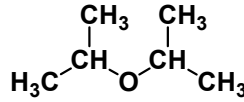
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>O

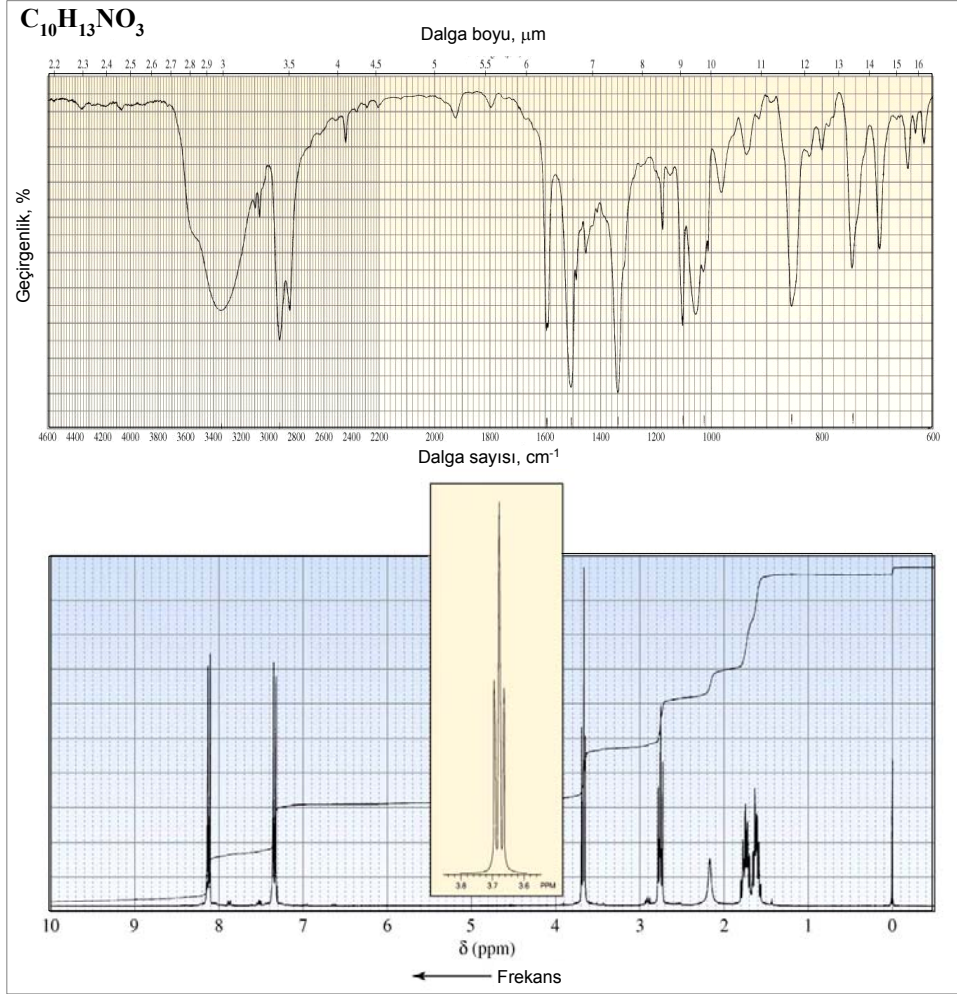


(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CHOCH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

diizopropileter  
(2-izopropoksipropan)

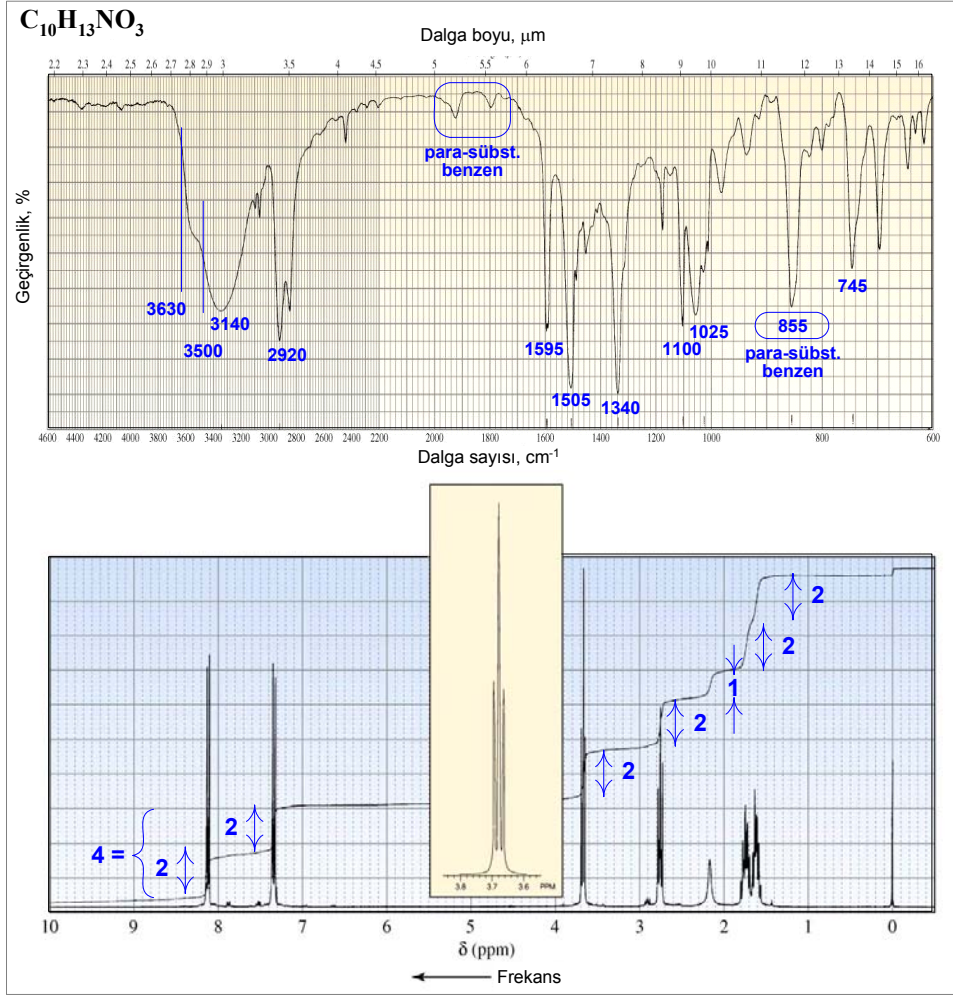
**ÖRNEK. 9**

Molekül formülü  $C_{10}H_{13}NO_3$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>3</sub>

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 10 + 2) - (13 - 1)}{2} = 5$$

Doymamış 5 birim vardır; 5 doymamışlık, halkalar ve/veya pi bağları gösterir.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
alkol/fenol	O-H gerilme	(3550-3200 (geniş))
aromatik	overtone bandlar	2000-1650
aromatik	-NO <sub>2</sub>	1340
alkol	C-O gerilme	1100
aromatik	para süstitüs.	855

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

IR verilere göre madde nitro grubu içeren bir para-süstitüe aromatik alkol olabilir;

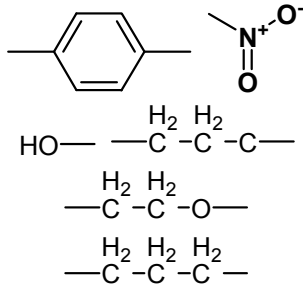
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	*δ, ppm	*integral	H sayısı	grup	
aromatik grup	8.1-7.3	4	4H	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -
triplet	3.7, 2.8	2, 2	2H, 2H	CH <sub>2</sub> , CH <sub>2</sub>	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -(C, O)
singlet	2.2	1	1H	OH	-OH
triplet-triplet	1.8, 1.7	2, 2	2H, 2H	CH <sub>2</sub> , CH <sub>2</sub>	-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -

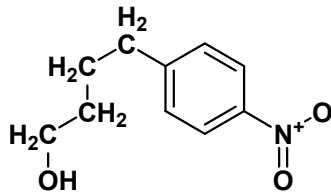
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>3</sub>

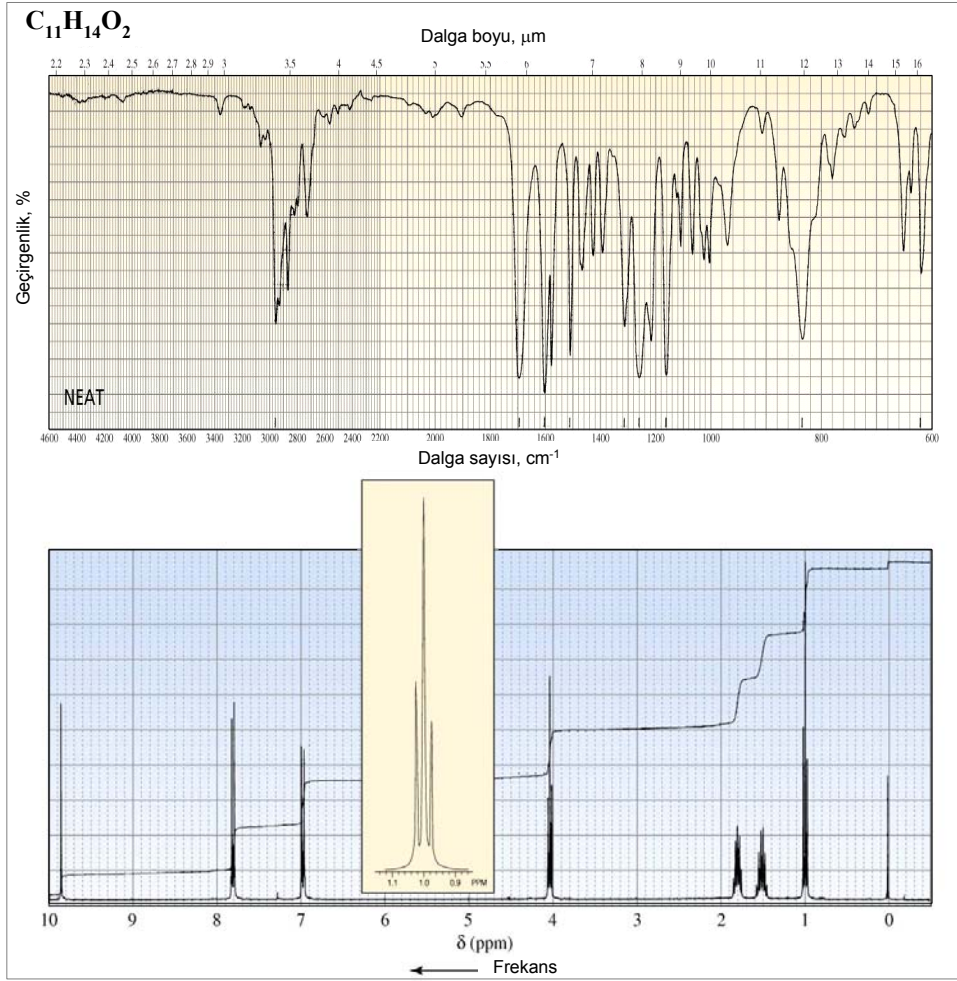


O<sub>2</sub>NC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>OH

4-(4-nitrofenil)-1-bütanol  
[4-(4-nitrofenil)bütan-1-ol]

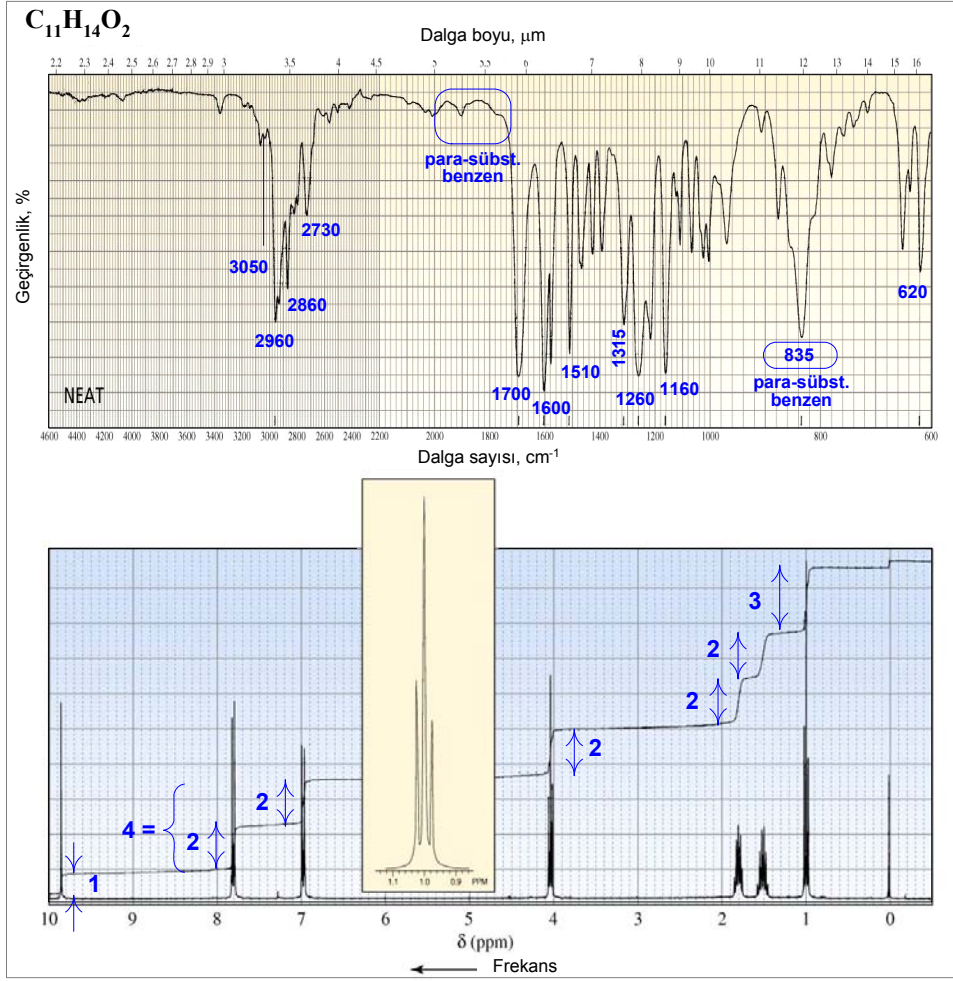
### ÖRNEK. 10

Molekül formülü  $C_{11}H_{14}O_2$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>11</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 11 + 2) - (14)}{2} = 5$$

Doymamış 5 birim vardır; 5 doymamışlık, halkalar ve/veya pi bağları gösterir.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
aromatik	C-H gerilme	3050
aldehit	C-H gerilme	2960
aldehit	C-H gerilme	2860, 2730
aromatik	overtone bandlar	2000-1650
keton, aldehit	C=O Stretch	1700
aromatik	C=C gerilme	1600, 1510
aromatik	para-sübst.	835

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

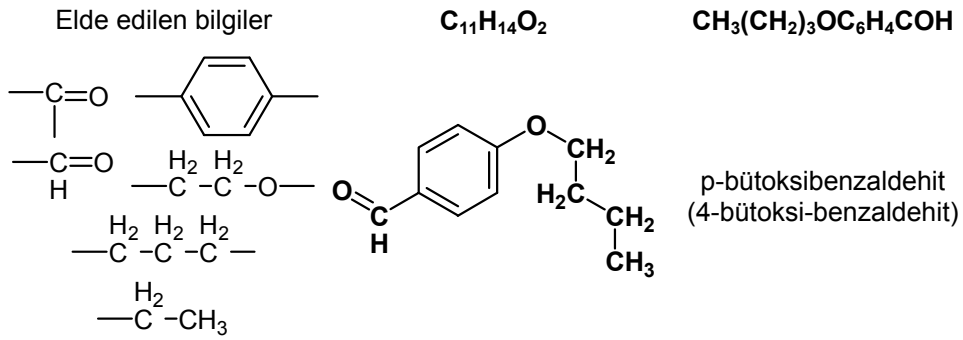
IR verilere göre madde bir para-süstitüe aromatik aldehit veya ketondur.

## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	*δ, ppm	*integral	H sayısı	grup	
singlet	9.9	1	1H	CH	-CH (=O olabilir)
aromatik grup	7.9, 7.0	4	4H	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -
triplet	4.2	2	2H	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - (O)
triplet-triplet	1.8	2	2H	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - CH <sub>2</sub> -
triplet-kuartet	1.4	2	2H	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> - CH <sub>3</sub>
triplet	0.9	3	3H	CH <sub>3</sub>	-CH <sub>2</sub> - CH <sub>3</sub>

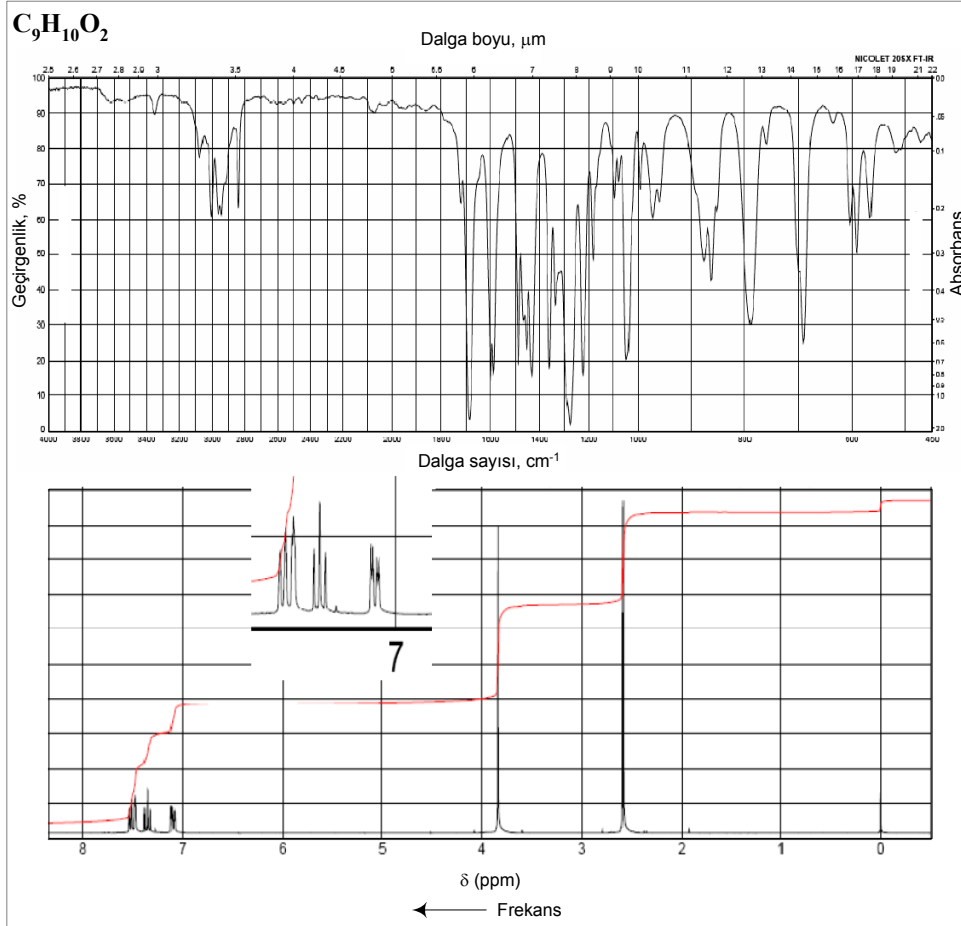
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ



**ÖRNEK. 11**

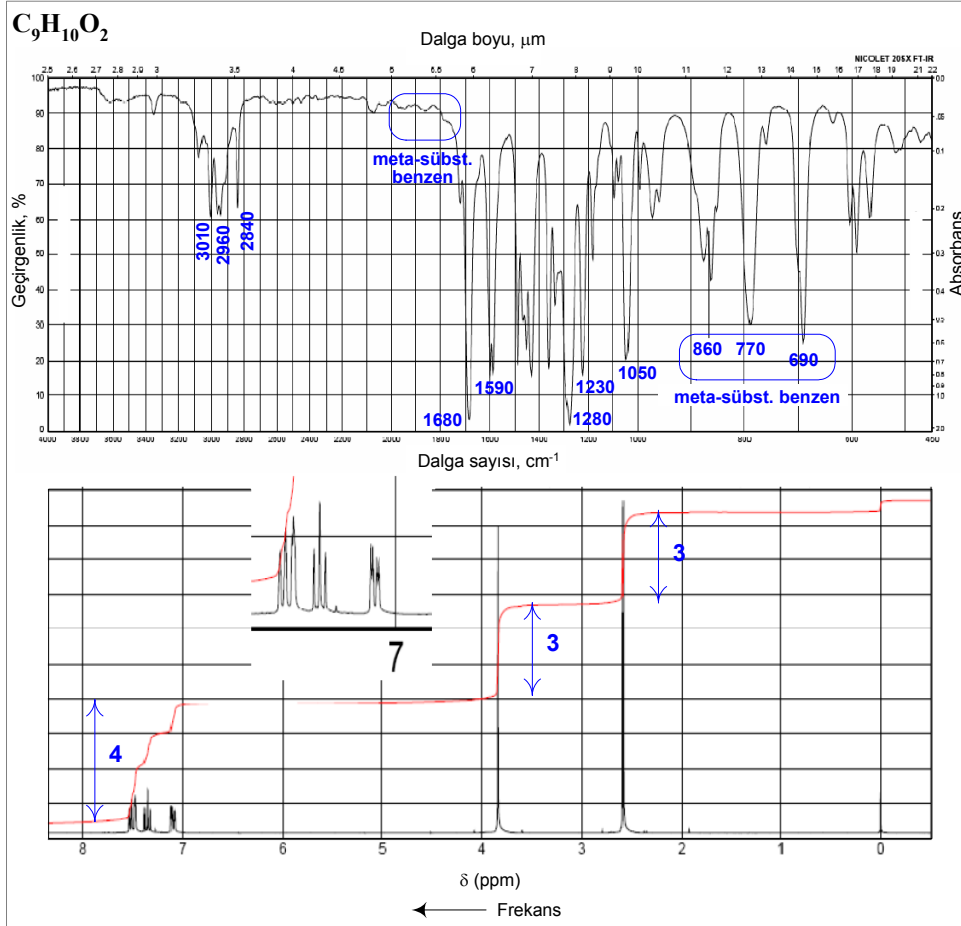
Molekül formülü  $C_9H_{10}O_2$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?





## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 9 + 2) - (10)}{2} = 5$$

Doymamış 5 birim vardır; 5 doymamışlık, halkalar ve/veya pi bağları gösterir.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
aromatik	C-H gerilme	3010
alkil	C-H gerilme	2960
aromatik	overtone bandlar	2000-1650
ketone	C=O Stretch	1680
aromatik	C=C gerilme	1590
aromatik	meta sübst.	860, 790, 690

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

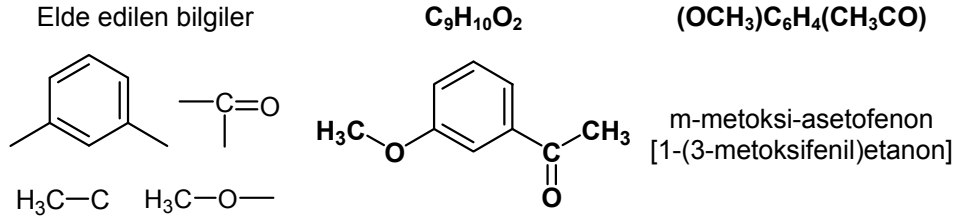
IR verilere göre bileşik 1,3-di-süstitüe (meta) aromatik bir keton olabilir.

## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	* $\delta$ , ppm	*integral	H sayısı	grup	
aromatik grup	7-7.5	4	4H	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -
singlet	3.8	3	3H	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> - (O veya C)
singlet	2.6	3	3H	CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> - (O veya C)

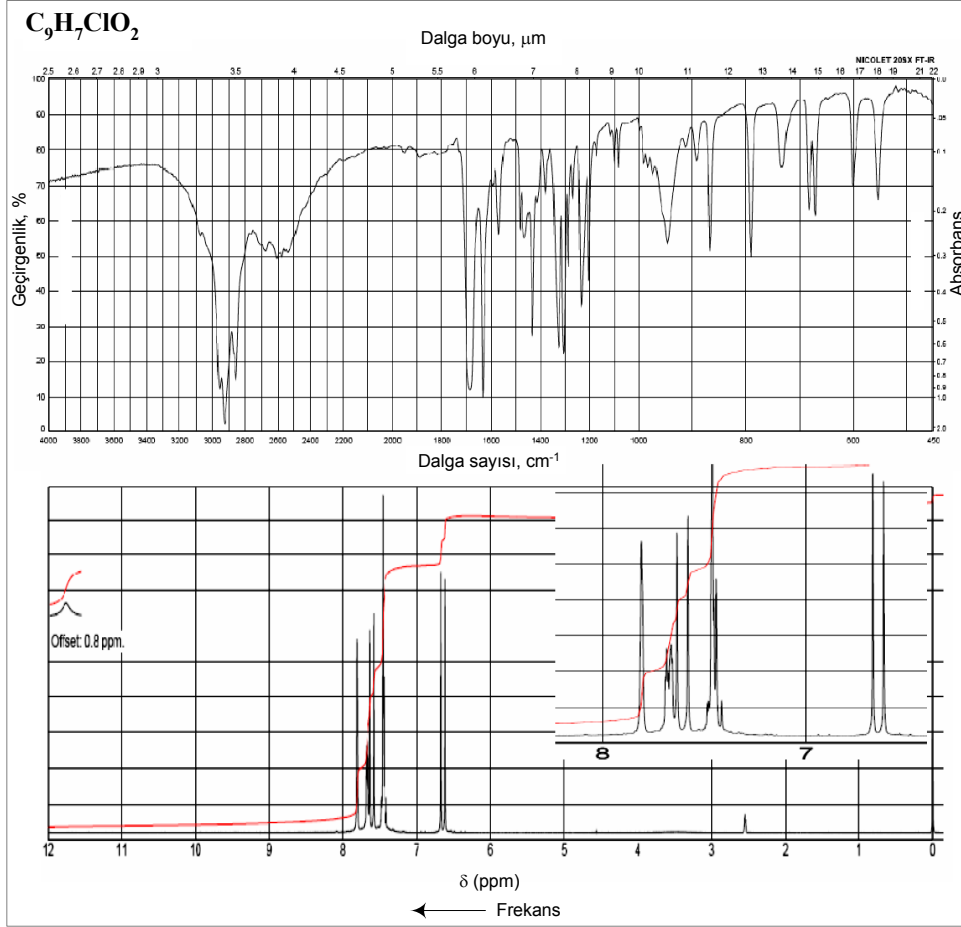
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ



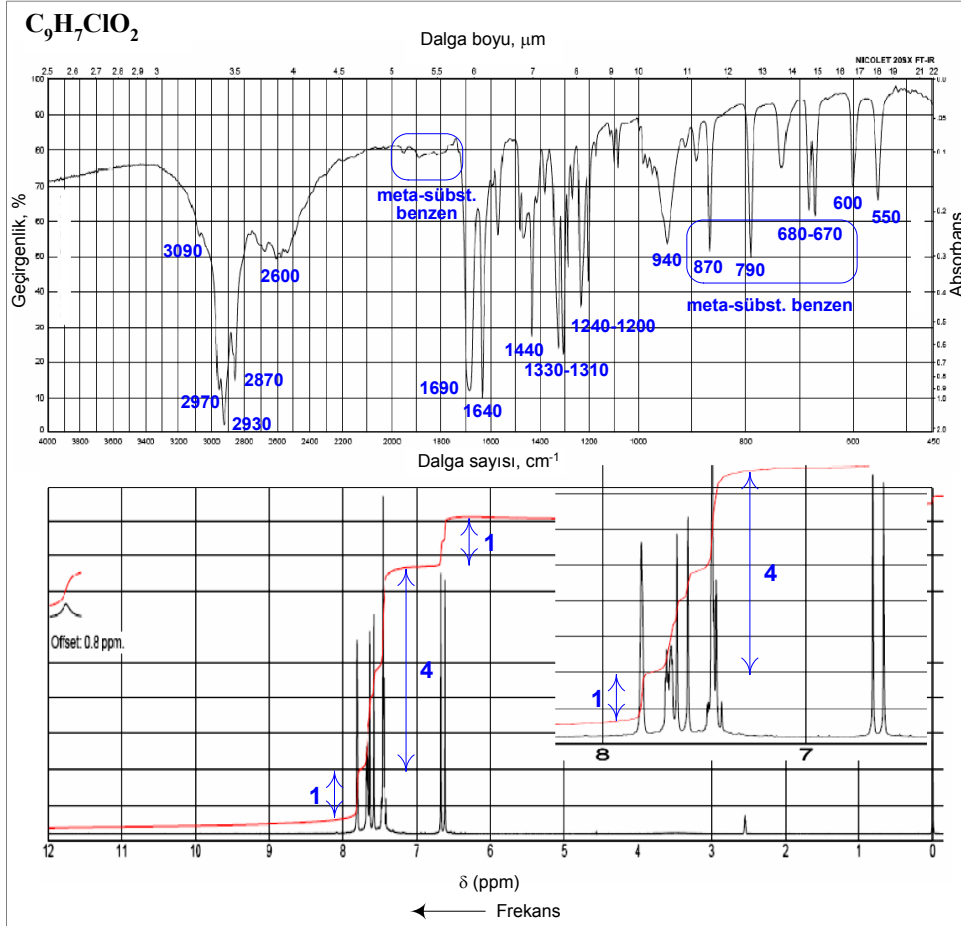
## ÖRNEK. 12

Molekül formülü  $C_9H_7ClO_2$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 9 + 2) - (7 + 1)}{2} = 6$$

Doymamış 6 birim vardır; 6 doymamışlık, halkalar ve/veya pi bağları gösterir.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
aromatik	C-H gerilme	3090
alkil	C-H gerilme	2970, 2930
aromatik	overtone bandlar	2000-1650
karboksilik asit	C=O gerilme	1690
alkil	C=C gerilme	1640
aromatik	meta sübst.	870, 790, 680

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

IR verilere göre bileşik 1,3-di-süstitüe (meta) aromatik bir karboksilik asit olabilir.

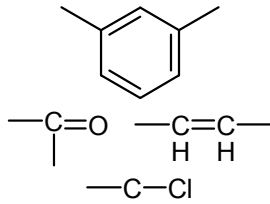
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	* $\delta$ , ppm	*integral	H sayısı	grup	
singlet	7.7	1	1H	OH	-OH
aromatik grup	7.6-7.3	4	4H	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	Cl-C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -R
dublet	6.6	1	1H	CH	-CH = CH-

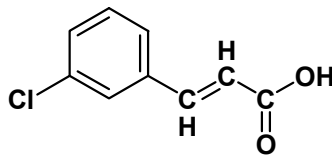
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



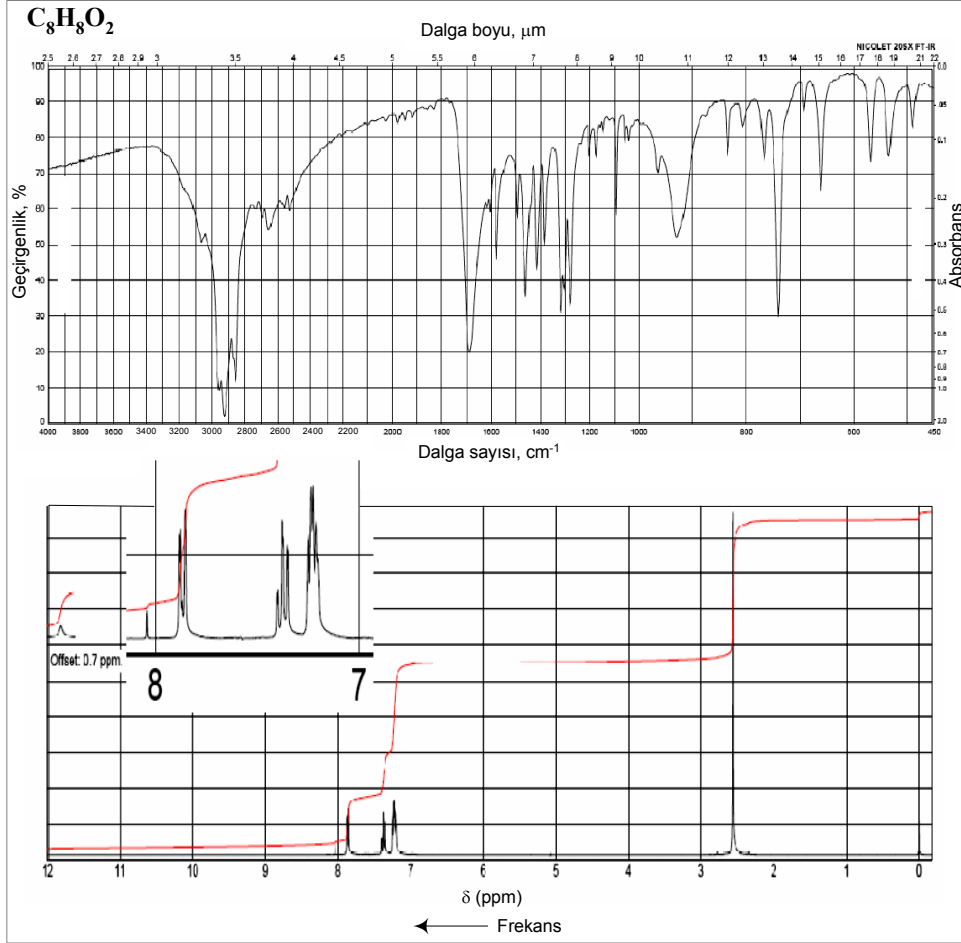
C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>



m-kloro-sinnamik asit  
[(E)-3-(3-klorofenil)akrilik  
asit;  
3-(3'-klorofenil)propenoik  
asit]

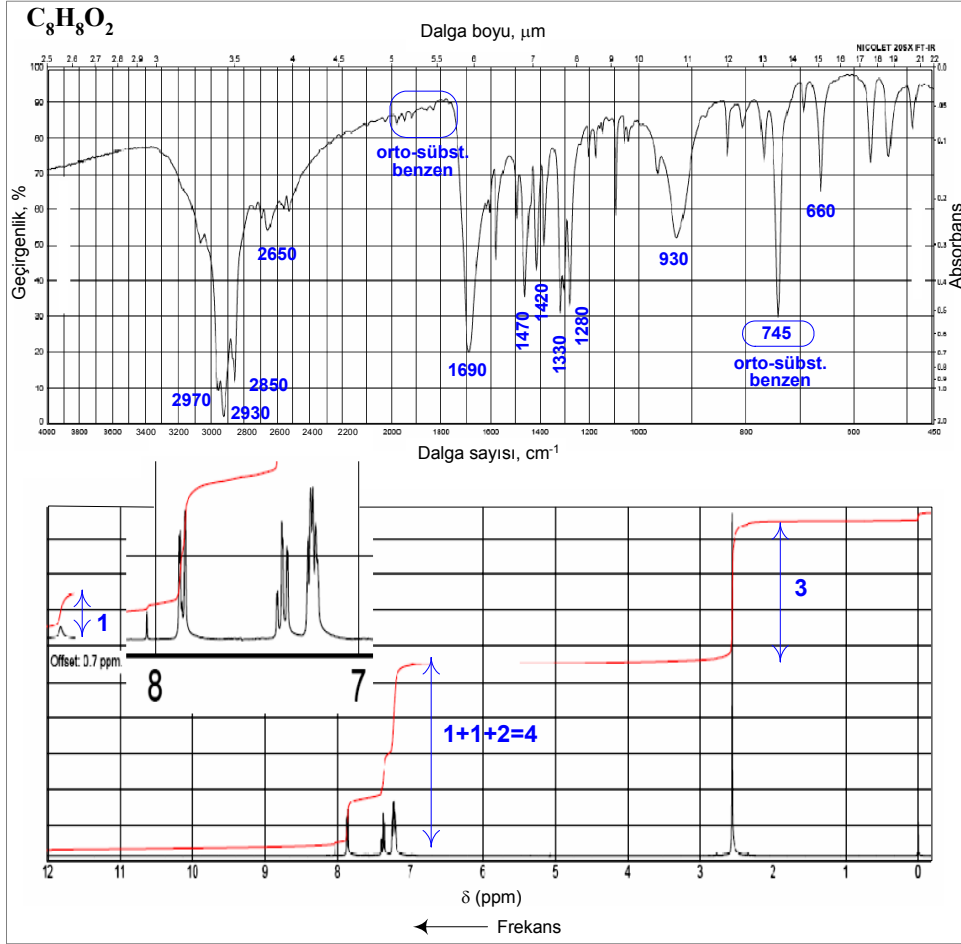
**ÖRNEK. 13**

Molekül formülü  $C_8H_8O_2$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>

$$\text{DD} = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 8 + 2) - (8)}{2} = 5$$

Doymamış 5 birim vardır; 5 doymamışlık, halkalar ve/veya pi bağları gösterir.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
alkil	C-H gerilme	2970
karboksilik asit	O-H gerilme	3000-2500
aromatik	overtone bandlar	2000-1650
karboksilik asit	C=O gerilme	1690
aromatik	orto sübst.	745

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

IR verilere göre bileşik 1,2-di-süstitüe (orto) benzen karboksilik asit olabilir.

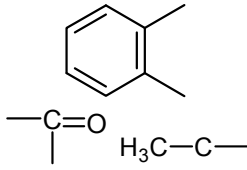
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	* $\delta$ , ppm	*integral	H sayısı	grup	
aromatik grup	7-8	4	4H	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -
singlet	2.6	3	3H	CH <sub>3</sub>	-C-CH <sub>3</sub>

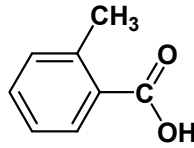
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

Elde edilen bilgiler



C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>



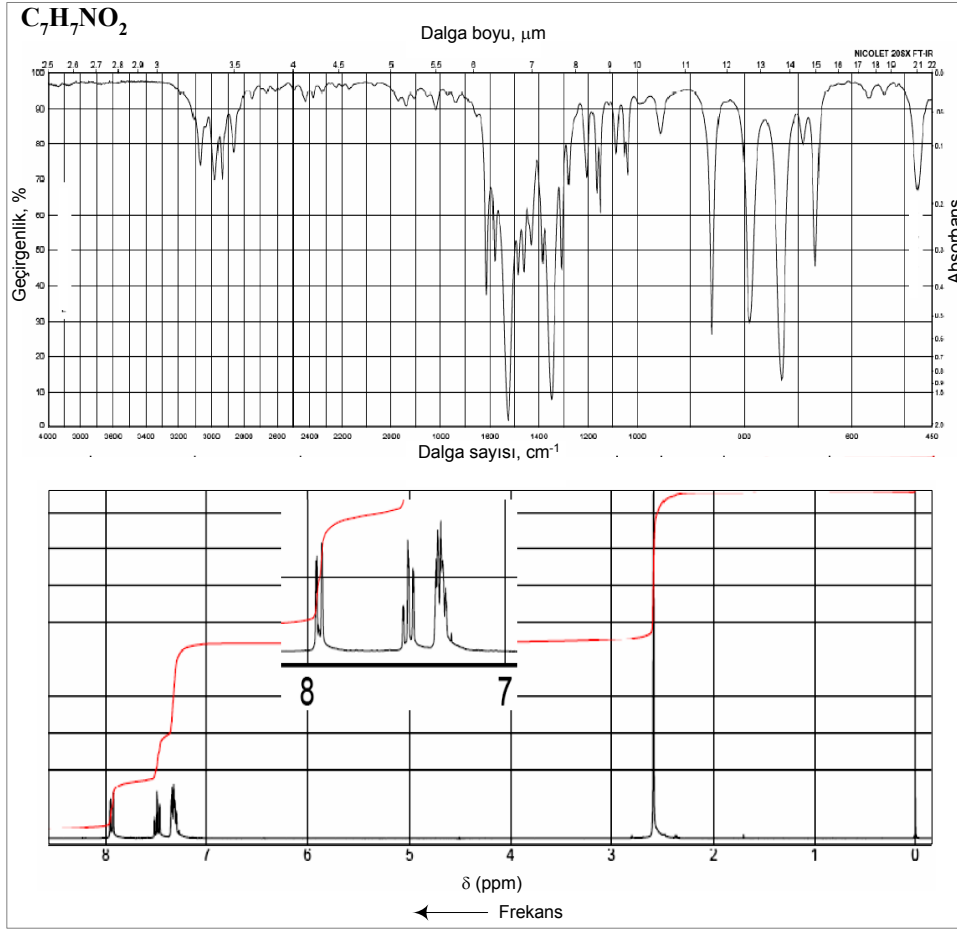
H<sub>3</sub>CC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>(COOH)

o-metil-benzoik asit  
(2-metilbenzoik asit)



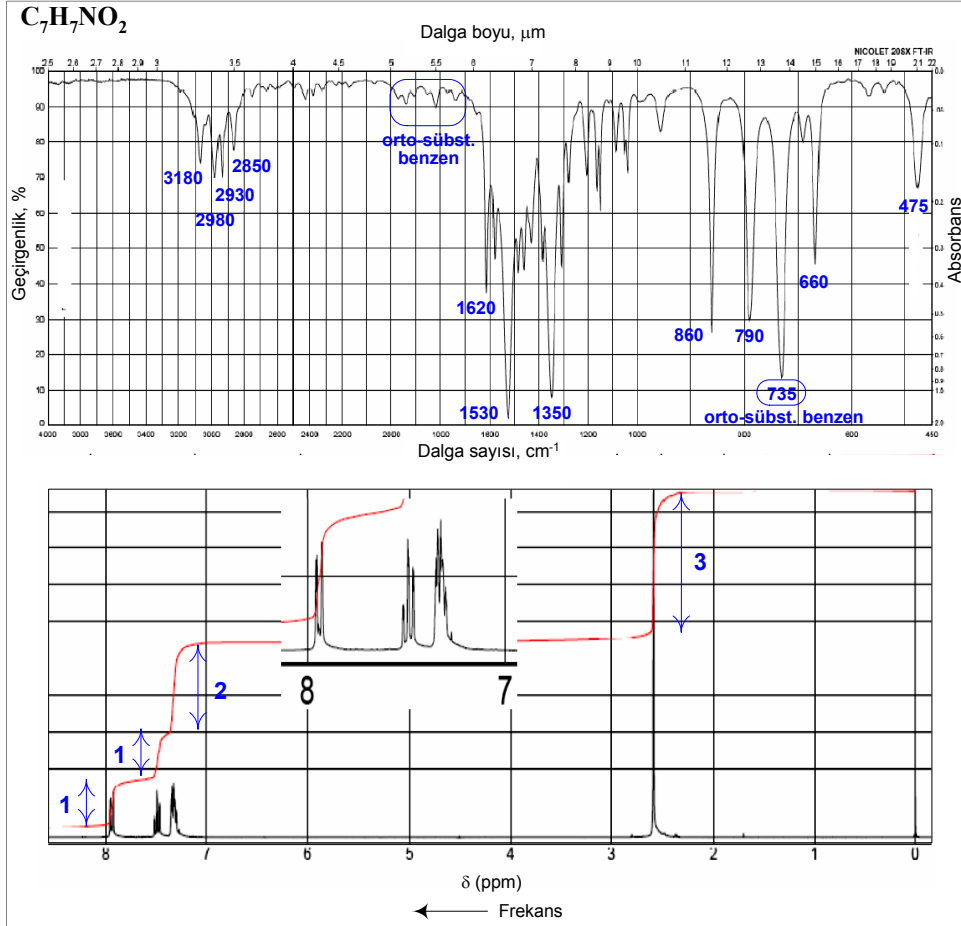
### ÖRNEK. 14

Molekül formülü  $C_7H_7NO_2$  olan bir bileşiğin yapısal formülü nedir?



## ÇÖZÜM

IR spektrumunda karakteristik absorpsiyon bantlarının yaklaşık dalga sayıları (cm<sup>-1</sup>), NMR'da yaklaşık integral ve  $\delta$  değerleri (ppm) işaretlenir.



### 1. Molekülün Doymamışlık Derecesi, DD:

Molekül formülü: C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>2</sub>

$$DD = \frac{(2c + 2) - (h - n + x)}{2} = \frac{(2 \times 7 + 2) - (7 - 1)}{2} = 5$$

Doymamış 5 birim vardır; 5 doymamışlık, halkalar ve/veya pi bağları gösterir.

## 2. IR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	*Dalga sayısı (cm <sup>-1</sup> )*
aromatik	C-H Stretch	3180
alkil	C-H Stretch	2980-2930
aromatik	overtone bandlar	2000-1650
aromatik	N=O	1530, 1350
aromatik	orto sübst.	735

\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

IR verilere göre bileşik nitro grubu içeren bir 1,2-di-süstitüe (orto) benzen olabilir.

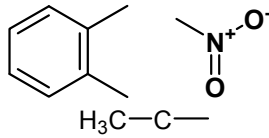
## 3. NMR Spektrum Verilerinin Değerlendirilmesi

	* $\delta$ , ppm	*integral	H sayısı	grup	
aromatik grup	8.-7.	4	4H	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> -
singlet	2.6	3	3H	CH <sub>3</sub>	-C-CH <sub>3</sub>

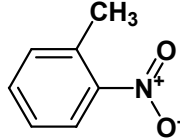
\*spektrumdan okunan yaklaşık değerler

## SONUÇ

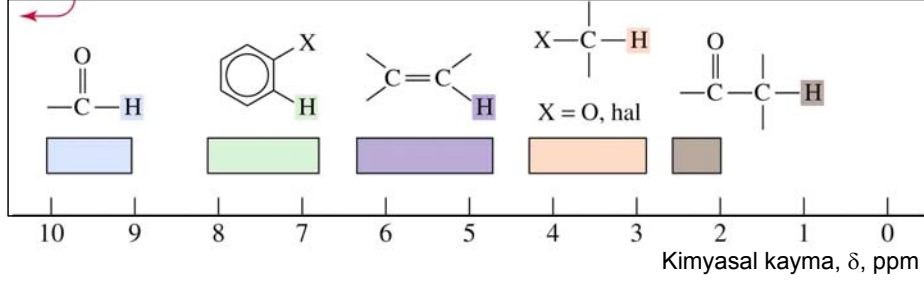
Elde edilen bilgiler



C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>NO<sub>2</sub>

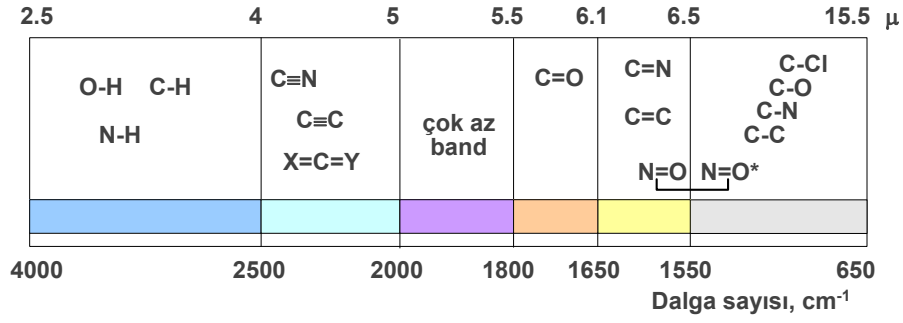







o-nitrotoluen  
(1-metil-2-nitrobenzen)

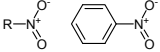
TABLO-1:  $^1\text{H}$  NMR KİMYASAL KAYMA DEĞERLERİ,  $\delta$ - COOH  $\delta = 11-12$ 

Proton Tipi	Yapı	$\delta$ , ppm
Siklopropan	$\text{C}_3\text{H}_6$	0.2
Primer	$\text{R}-\text{CH}_3$	0.9
Sekonder	$\text{R}_2-\text{CH}_2$	1.3
Tersiyer	$\text{R}_3-\text{C}-\text{H}$	1.5
Vinilik	$\text{C}=\text{C}-\text{H}$	4.6-5.9
Asetilenik	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	2-3
Aromatik	$\text{Ar}-\text{H}$	6-8.5
Benzilik	$\text{Ar}-\text{C}-\text{H}$	2.2-3
Allilik	$\text{C}=\text{C}-\text{CH}_3$	1.7
Fluorürler	$\text{H}-\text{C}-\text{F}$	4-4.5
Klorürler	$\text{H}-\text{C}-\text{Cl}$	3-4
Bromürler	$\text{H}-\text{C}-\text{Br}$	2.5-4
İyodürler	$\text{H}-\text{C}-\text{I}$	2-4
Alkoler	$\text{H}-\text{C}-\text{OH}$	3.4-4
Eterler	$\text{H}-\text{C}-\text{OR}$	3.3-4
Esterler	$\text{RCOO}-\text{C}-\text{H}$	3.7-4.1
Esterler	$\text{H}-\text{C}-\text{COOR}$	2-2.2
Asitler	$\text{H}-\text{C}-\text{COOH}$	2-2.6
Karbonil bileşikleri	$\text{H}-\text{C}-\text{C}=\text{O}$	2-2.7
Aldehidik	$\text{R}-\text{(H-)}\text{C}=\text{O}$	9-10
Hidroksilik	$\text{R}-\text{C}-\text{OH}$	1-5.5
Fenolik	$\text{Ar}-\text{OH}$	4-12
Enolik	$\text{C}=\text{C}-\text{OH}$	15-17
Karboksilik	$\text{RCOOH}$	10.5-12
Amino	$\text{RNH}_2$	1-5

**TABLO-2: IR SPEKTROSKOPİSİ  
FONKSİYONEL GRUP DALGA SAYILARI,  $\text{cm}^{-1}$**



Fonksiyonel grup	Moleküler hareket	Dalga sayısı ( $\text{cm}^{-1}$ )
Aklanlar	C-H gerilme	2950-2800
	CH <sub>2</sub> eğilme	~1465
	CH <sub>3</sub> eğilme	~1375
	CH <sub>2</sub> eğilme ( $\geq 4$ )	~720
	C-C gerilme ve eğilmeler	1360-1470
	C-C (...-CH <sub>2</sub> -CH <sub>2</sub> -...)	1450-1470
	C-C (...-CH <sub>2</sub> -CH <sub>3</sub> )	1360-1390
Aromatikler     	C-H gerilme	3020-3000
	C=C gerilme	~1600, ~1475
	Overtone bantlar	2000-1650
	C-H eğilme (mono, 2 bant)	770-730, 715-685
	C-H eğilme (orto, 1 bant)	770-735
	C-H eğilme (meta, 3 bant)	860-900, 750-810, 680-725
C-H eğilme (para, 1 bant)	850-800	
Alkoller	O-H gerilme	~3650, 3400-3300
	C-O gerilme	1260-1000
Eterler	C-O-C gerilme (dialkill)	1300-1000
	C-O-C gerilme (diarill)	~1250, ~1120
Aldehitler	C-H aldehit gerilme	~2850, ~2750
	C=O gerilme	~1725
Ketonlar	C=O gerilme	~1715

	C-C gerilme	1300-1100
Karboksilik asitler	O-H gerilme	3400-2400
	C=O gerilme	1730-1700
	C-O gerilme	1320-1210
	O-H eğilme	1440-1400
	C=O gerilme	1750-1735
Esterler	C-C(O)-C gerilme (asetatlar)	1260-1230
	C-C(O)-C gerilme (diğerleri)	1210-1160
	C=O gerilme	1810-1775
Asit klorürler	C-Cl gerilme	730-550
	C=O gerilme	1830-1800, 1775-1740
Anhidritler	C-O gerilme	1300-900
	C-F gerilme	1400-1000
Alil halojenler	C-Cl gerilme	785-540
	C-Br gerilme	650-510
	C-I gerilme	600-485
	C-F gerilme	1400-1000
Ntro grupları 	-NO <sub>2</sub> (alifatik)	1600-1530, 1390-1300
	-NO <sub>2</sub> (aromatik)	1550-1490, 1355-1315

## Yararlanılan Kaynaklar

[http://wps.prenhall.com/wps/media/objects/724/741576/chapter\\_14.html](http://wps.prenhall.com/wps/media/objects/724/741576/chapter_14.html)