

שאלות הכנה - מעבדה 5

NMR and IR spectra & vibrational analysis

1. מהו תחום האנרגיה האופיינית ל-NMR ו-IR ?
2. מהם אופני תנועה אורתוגונאליים (normal modes)? במולקולה בעלת 15 אטומים, כמה אופנים כאלה ישנם? כמה מהם הם אופני תנודה פנימיים?
3. מולקולה N אטומית, לא-ליניארית, עברה אופטימיזציה גיאומטרית. לאחר לכסון ההסיאן, התקבלו $3N-7$ איברים חיוביים על האלכסון, ושבעה שערכם קרוב לאפס. הסבר מה ניתן ללמוד מכך על:
א. קונפיגורציית המולקולה ו/או התכנסות האופטימיזציה הגיאומטרית.
ב. מה ניתן היה לומר על כך לו בדיוק אחד האיברים האי-חיוביים היה שלילי (והשאר, כאמור, קרובים לאפס).
4. הסבר בקצרה את עקרון ה-NMR. מה ההסבר להופעת הסיגנלים השונים?
5. הסבר בקצרה מהי תדירות Larmor.
6. סקאלת ההיסט הכימי של ספקטרום תהודה מגנטי גרעיני ניתן ביחידות ppm (parts per million) ביחס לתרכובת ייחוס. הסבר את הסקאלה ואת הקשר בין ההיסט הכימי ביחידות תדירות (הרץ) להיסט הכימי ביחידות ppm.
7. מהי תרכובת הייחוס (reference) בניסוי NMR? מה צריכות להיות תכונותיה? מדוע משתמשים לרוב ב-TMS?