**ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΑΚΗ ΑΣΚΗΣΗ ΣΥΓΚΡΙΣΗΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΕΤΑΤΟΠΙΣΕΩΝ ΚΑΙ ΜΕΡΙΚΩΝ ΦΟΡΤΙΩΝ ΣΕ ΑΡΩΜΑΤΙΚΕΣ ΕΝΩΣΕΙΣ**

Δίνονται οι δομές του βενζολίου, ανιλίνης και βενζοϊκού οξέος.



Α Β Γ

Οι χημικές μετατοπίσεις των ορθο (Η1), μετα(Η2) και παρα(Η3) του 1Η NMR καταγράφονται στον Πίνακα 1. Για το βενζόλιο φυσικά όλα τα πρωτόνια είναι ισοδύναμα οπότε οι χημικές μετατοπίσεις και τα μερικά φορτία θα είναι τα ίδια.

1. Γράψετε τις δομές συντονισμού για τα τρία παραπάνω μόρια.
2. Μπορείτε να διαπιστώσετε κάποιο συσχετισμό μεταξύ των φορτίων και της χημικής μετατόπισης;
3. Κατεβάστε το άρθρο των Μ.Α. Zdanovskaia et al J. Chem. Educ. 2018, 95, 1960-1965 από το e-class του μαθήματος.
4. Στη σελίδα 1961 πατήστε το supporting information και στην πρώτη σελίδα που θα εμφανιστεί στον διαδικτυακό χώρο πιέστε τον σύνδεσμο <http://compmodel.chem.wisc.edu/>.
5. Στην άσκηση 2 στα ΝΒΟ των τριών μορίων βρείτε στο Data Viewer με τη χρήση του μεγεθυντικού φακού τα μερικά φορτία των Η1,Η2,Η3 των τριών μορίων.
6. Ισχύει ο συσχετισμός που διαπιστώσατε με την απάντηση της ερώτησης 2; Προσπαθήστε να ποσοτικοποιήσετε τα αποτελέσματα σας συμπληρώνοντας τον Πίνακα 1. Ένα παράδειγμα σας είναι ήδη συμπληρωμένο. Πριν προχωρήσετε επιβεβαιώστε τους αριθμούς του πίνακα.

**Πίνακας 1:** 1H NMR τιμές Η1-Η3 των ενώσεων βενζόλιο, ανιλίνη και βενζοϊκό οξύ και τα μερικά τους φορτία.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Μερ. Φορτίο (Α1) | δ(Α2) | Μερ. Φορτίο (Β1) | δ(Β2) | Μερ. Φορτίο (Γ1) | δ(Γ2) | Β1-Α1 | δΒ2-δΑ2 | Γ1-Α1 | δΓ2-δΑ2 |
| Η1 | -0.243 | 7.33 | -0.292 | 6.64 | -0.198 | 8.15 | -0.049 | -0.69 | 0.05 | 0.82 |
| Η2 |  | 7.33 |  | 7.12 |  | 7.49 |  |  |  |  |
| Η3 |  | 7.33 |  | 6.73 |  | 8.63 |  |  |  |  |