

الحل النموذجي لامتحان مقياس المطيافية الجزيئية

الاسم و اللقب:	الفوج:
----------------	--------

التمرين 1: 6

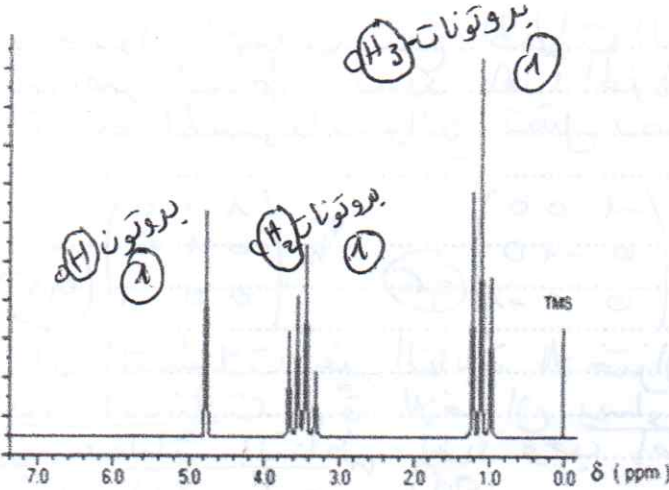
يعطي الشكل المقابل طيف RMN البروتون لجزئ

الايثانول ذو الصيغة الكيميائية: $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$.

1- انطلاقا من قيمة الانزياح الكيميائي و درجة التضاعف ، عين على الشكل مجموعة البروتونات المتكافئة الموافقة لكل إشارة.

2- اشرح سبب التضاعف.

3- ماذا نضي بتغطية (blindage) أو عدم تغطية (déblindage) البروتون . وكيف يؤثر ذلك على قيمة الانتقال الكيميائي؟



سبب التضاعف هو الإقتران بين مجموعتي بروتونات متكافئة A

و B مختلفة فعند وجود n بروتون مجاور لمجموعة بروتونات متكافئة

ما، فإن إشارة هذه الأخيرة ستكون مكونة من n+1 قمة قريبة من بعضها

و تكون البروتون مغلف إذا كانت الكثافة الإلكترونية حوله مرتفعة

فيخفض تأثير الحقل المغناطيسي عليه وبالتالي تكون قيمة الانزياح الكيميائي

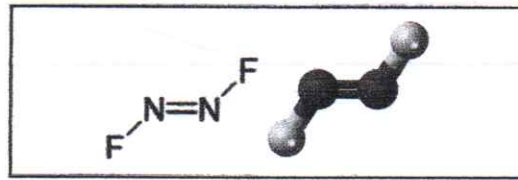
ويكون البروتون غير مغلف إذا انخفضت الكثافة الإلكترونية

حوله (بسبب وجود ذرات مجاورة ذات كهروسلبية عالية)، فيزداد

تأثير الحقل المغناطيسي ويزداد الانزياح الكيميائي

التمرين 2: 14ن

1- اعط جدول الصفات لزمرة جزئ ثنائي فلوريد ثنائي النيتروجين (N₂F₂) المعطى في الشكل الموالي.



لايجاد جدول الصفات نتبع الخطوات التالية:
 1- عناصر التناظر: يملك هذا الجزيء العناصر التالية: E, C₂, i, σ_h
 2- كتابة المصفوفات والتي تحفل تمثيلا قابلا للاختزال.

$$E_i \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_2 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad i \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \sigma_h \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

3- ايجاد التمثيلات غير القابلة للاختزال.

E C₂ i σ_h

عدد التمثيلات غير الاختزال يساوي عدد عناصر التناظر. لذلك يجب إضافة تمثيل رابع Γ₄.

Γ₁ 1 1 1 1

Γ₂ 1 -1 -1 1

Γ₃ 1 1 -1 -1

Γ₄ a b c d

لايجاد قيم صفات Γ₄ نطبق قاعدة الكامد:

$$\sum_{I \neq J} g(I) \chi_I(\rho I_i) \chi_J(\rho I) = 0$$

$a + b + c + d = 0$ --- (1)
 $a - b - c + d = 0$ --- (2)
 $a + b - c - d = 0$ --- (3)

وحيث قاعدة القسود: $g(I) \sum_{\rho I} \chi_I(\rho I) = h$
 $a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = 1$
 $a^2 = 1$
 $a = 1$

وبما أن a تعطى قيمة التمثيل فإذن:
 $a = -b, a = -c, a = d$
 $d = 1, c = 1, b = -1$

وبتطبيق تسميات ميلر كان الجدول

E C₂ i σ_h

Γ₁ Ag 1 1 1 1

Γ₂ Bg 1 -1 -1 -1

Γ₃ Au 1 1 -1 -1

Γ₄ Bu 1 -1 -1 1