

Obowiązujące związki na II sprawdzian

ENOLE I IMIDY

1. Barbital
2. Heksobarbital
3. Metylofenobarbital
4. Fenobarbital
5. Fenobarbital sodowy
6. Primidon
7. Fenytoina
8. Fenytoina sodowa
9. Kwas askorbowy
10. Fenylbutazon
11. Propylotiouracyl
12. Tiamazol
13. Tiopental sodowy

SULFONAMIDY

1. Acetozolamid
2. Furosemid
3. Glibenklamid
4. Hydrochlorotiazyd
5. Sulfacetamid sodowy
6. Sulfametoksazol
7. Sulfanilamid
8. Sulfatiazol
9. Sulfafurazol
10. Tolbutamid

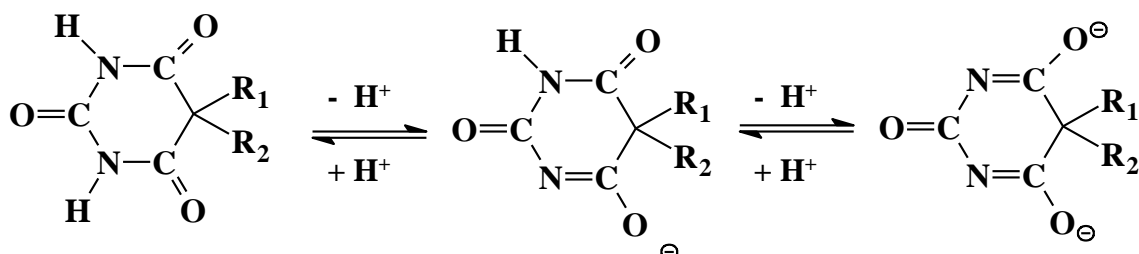
KSANTYNY

1. Kofeina
2. Diprofilina
3. Pentoksyfilina
4. Teofilina
5. Teobromina
6. Etofilina
7. Proksyfilina
8. Aminofilina (teofilina z etylenodiaminą)
9. Dimenhydramina

Wymagania w zakresie spektroskopii (II sprawdzian)

ENOLE I IMIDY

Spektroskopia UV



w postaci niezjonizowanej
(środowisko kwasowe np. 0,1 mol/l HCl)
nie wykazuje maks. absorpcji >220 nm

w postaci monoanionu
(w buforze boranowym pH 10)
 λ_{\max} 238-241 nm

w postaci dianionu
(w 0,2 mol/l NaOH)
 λ_{\max} 252-255 nm

N-metylobarbiturany

są kwasami jednozasadowymi w pH i wyższym: λ_{\max} 248 nm

Tiobarbiturany

w środowisku kwasowym: λ_{\max} 240 i 285 nm, w pH 10 λ_{\max} 252 i 305 nm, w NaOH λ_{\max} 305 nm

Spektroskopia IR

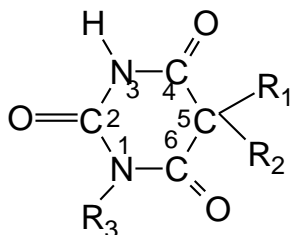
ν N-H (grupa imidowa)	3300 – 3000 cm^{-1}
ν C-O (amidowe I)	~ 1770 i 1700 cm^{-1} oraz 1650 i 1550 cm^{-1} (w widmie soli sodowych)
ν CN (amidowe III)	~ 1300 cm^{-1}
γ N-H (amidowe V)	~ 850 cm^{-1}

Ar fenobarbital, m-fenobarbital, fenytoina, prymidon	ν C=C	1650 – 1450 cm^{-1}
	ν C-H	3100 – 3000 cm^{-1}
	δ C-H	1200 – 950 cm^{-1}
	γ C-H	poniżej 950 cm^{-1}
R barbital, tiopental	ν C-H	3000 – 2800 cm^{-1}

Spektroskopia $^1\text{H-NMR}$

Protony -NH- grupy imidowej	8,3 ppm	(singlet)
Protony od alkili R	0-5 ppm	
Protony od pierścienia	6-8 ppm	

Spektroskopia ^{13}C -NMR



C-2 ~ 150 ppm

C-5 ~ 50 ppm

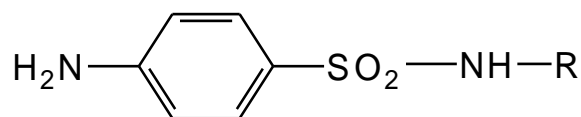
C-4 i C-6 ~ 170 ppm

Spektrometria MS

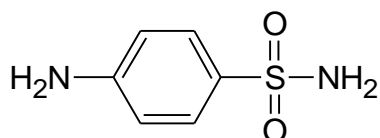
Enole i imidy	Jony rejestrowane	m/z	Komentarz
Barbital	$[\text{M}]^{+\cdot}$	M = M.cz.	Jon molekularny
	$[\text{M}-\text{C}_4\text{H}_8]^{+\cdot}$	M-56	Odszczepienie podstawników alkilowych
Fenobarbital Metylofenobarbital	$[\text{M}]^{+\cdot}$	M = M.cz.	Jon molekularny
	$[\text{M}-\text{C}_2\text{H}_4]^{+\cdot}$	M-28	Odszczepienie podstawnika etylowego
Tiopental	$[\text{M}]^{+\cdot}$	M = M.cz.	Jon molekularny bardzo nietrwały
	$[\text{M}-\text{C}_2\text{H}_4]^{+\cdot}$	M-28	Odszczepienie podstawnika etylowego
	$[\text{M}-\text{C}_5\text{H}_{10}]^{+\cdot}$	M-78	Odszczepienie reszty alkilowej
Kwas askorbowy	$[\text{M}]^{+\cdot}$	M = M.cz.	Jon molekularny
	$[\text{M}-\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2]^{+\cdot}$	M-60	
Fenylobutazon	$[\text{M}]^{+\cdot}$	M = M.cz.	Jon molekularny
	$[\text{M}-\text{C}_6\text{H}_5]^{+}$	M-77	Odszczepienie pierścienia aromatycznego
	$[\text{M}-\text{C}_4\text{H}_8]^{+}$	M-56	Odszczepienie C_4H_8
Prymidon	$[\text{M}]^{+\cdot}$	M = M.cz.	Jon molekularny
	$[\text{M}-\text{C}_2\text{H}_4]^{+\cdot}$	M-28	Odszczepienie podstawnika etylowego
Tiamazol	$[\text{M}]^{+\cdot}$	M = M.cz.	Jon molekularny

SULFONAMIDY

Spektroskopia UV

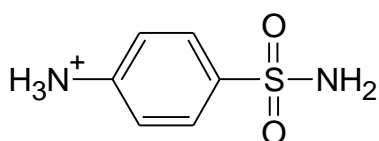


Sulfanilamid:



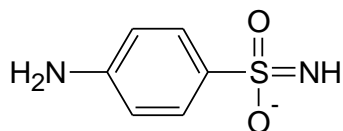
$\lambda_{\text{max}} = 258 \text{ nm}$

metanol



$\lambda_{\text{max}} = 218 \text{ nm}$

HCl



$\lambda_{\text{max}} = 252 \text{ nm}$

NaOH

Pochodne sulfanilamidu: podstawnik R moze byc zawierac ugrupowanie chromoforowe
 λ_{max} w zakresie 220-310 nm
 np. chromofor pirymidynowy 243 nm i 303 nm (0,1 mol/l HCl)

Spektroskopia IR

Dla grupy sulfonamidowej:

ν SO₂ asym 1370-1300 cm⁻¹

ν SO₂ sym 1180-1140 cm⁻¹

ν S-N ~ 850 cm⁻¹

Ar-NH ₂	ν N-H	ok. 3400 cm ⁻¹	asymetryczne
		ok. 3300 cm ⁻¹	symetryczne
	2 x δ N-H	ok. 3200 cm ⁻¹	nadton
	δ N-H	ok. 1600 cm ⁻¹	
Ar	γ N-H	ponizej 900 cm ⁻¹	
	ν C=C	1650 – 1450 cm ⁻¹	
	ν C-H	3100 – 3000 cm ⁻¹	
	δ C-H	1200 – 950 cm ⁻¹	
R	γ C-H	ponizej 950 cm ⁻¹	
	ν C-H	3000 – 2800 cm ⁻¹	

