

Задание 1: Вещество: Na_3FeF_6 (гексафтороферрат (III) натрия)

Кристаллографические данные

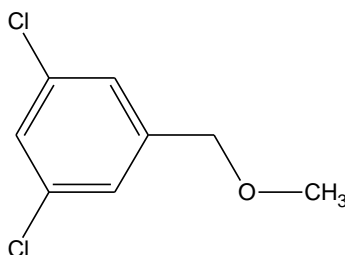
Состояние	Сингония	Класс симметрии	Пространственная группа	Структурный тип
кII(alpha)	монокл.	2/m	P21/c(C2h5)	$\text{Na}_3[\text{AlF}_6]$, cryolite
кI(beta)	куб.			$(\text{NH}_4)_3[\text{AlF}_6]$

Параметры фазовых переходов

Тип перехода	p, атм	T, К	t°C	DN, ккал/моль	DS, кал/моль·К
кII->кI		903	630±10		
кII->кI	0	1143	870±5		
кI->ж		1093	820±20		

Найдено в БД ТКВ: http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?tabno=101&volno=10&show=termodata&letter=&no=1504&allow_more_atoms=&p g=0&allow_no_ions=&brutto=Na3%28FeF6%29&joules=0&allow_additional_elements=

Задание 2:



1,3-dichloro-5-(methoxymethyl)benzene

Molecular Formula = $\text{C}_8\text{H}_8\text{Cl}_2\text{O}$

Clc1cc(COC)cc(Cl)c1

InChI=1/C8H8Cl2O/c1-11-5-6-2-7(9)4-8(10)3-6/h2-4H,5H2,1H3

Задание 3: База данных PubChem

Данной формулы в базе данных PubChem нет.

(это утверждение будет проверяться)

Задание 4: База данных NIST, поиск вещества 2,6-Dichlorobenzyl methyl ether

Formula: C₈H₈Cl₂O Molecular weight: 191.055

IUPAC Standard InChI: InChI=1S/C₈H₈Cl₂O/c1-11-5-6-7(9)3-2-4-8(6)10/h2-4H,5H2,1H3

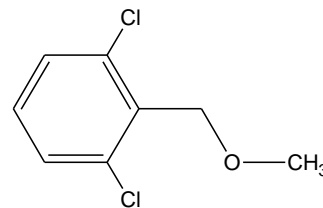
IUPAC Standard InChIKey: QBKBHXIQLAMKOB-UHFFFAOYSA-N

CAS Registry Number: 33486-90-7

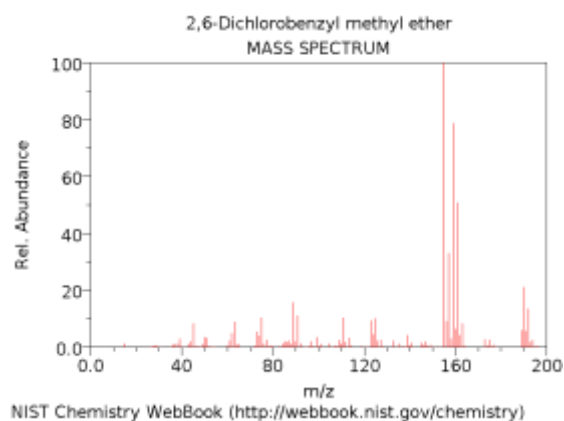
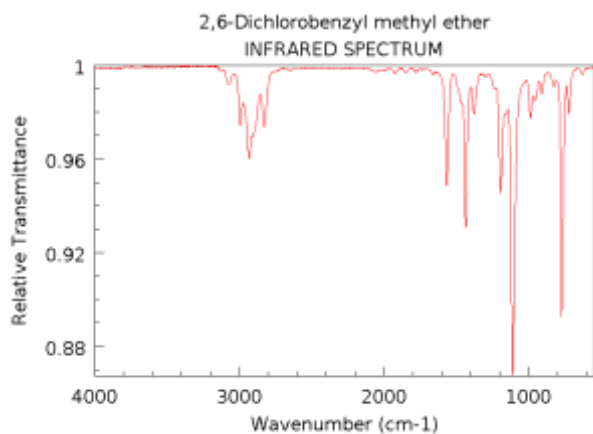
Chemical structure:

This structure is also available as a 2d Mol file.

Other names: Benzene, 1,3-dichloro-2-(methoxymethyl)-; 1,3-Dichloro-2-(methoxymethyl)benzene



ИК и Масс-спектры:



(Замечание: Нет примеров данных по ТД, ГЖХ)

Задание 5: База данных_SDBS No: 18969

CAS Registry No.: 33486-90-7

Molecular Formula: C₈H₈Cl₂O

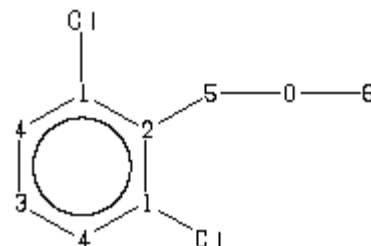
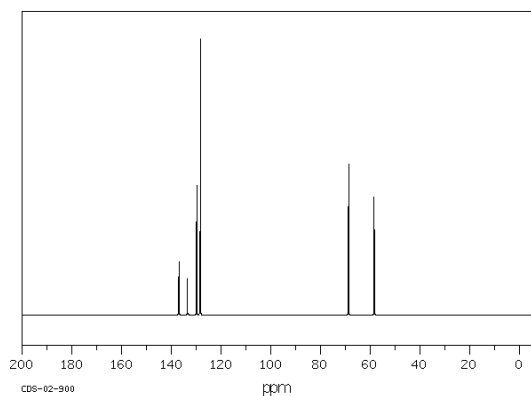
Molecular Weight: 191.1

Compound Name: 1,3-dichloro-2-(methoxymethyl)benzene; 2,6-dichlorobenzyl methyl ether

SDBS-¹³C NMR SDBS No. 18969CDS-02-900 22.53 MHz

C₈ H₈ Cl₂ O

0.05 ml : 0.5 ml CDCl₃



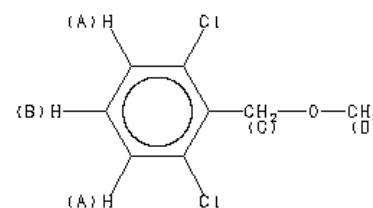
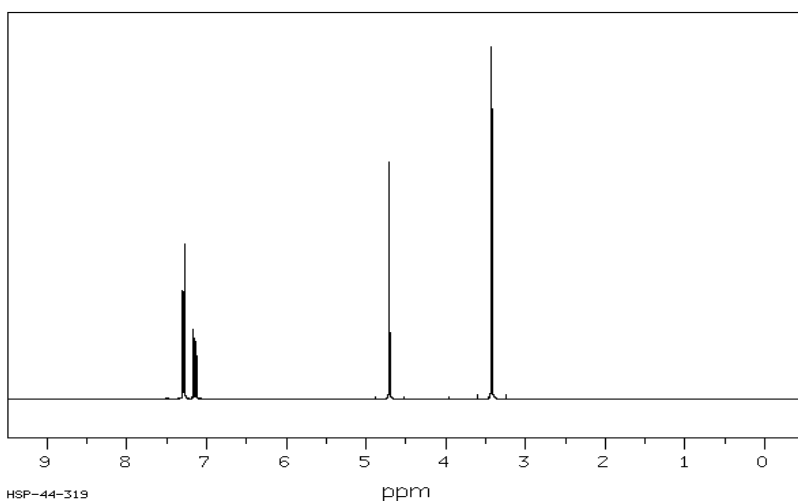
ppm	Int.	Assign.
136.96	190	1
133.50	131	2
129.83	469	3
128.36	1000	4
68.74	546	5
58.39	426	6

SDBS-¹H NMR SDBS No. 18969HSP-44-319

C₈ H₈ Cl₂ O **1,3-dichloro-2-(methoxymethyl)benzene**

399.65 MHz

0.05 ml : 0.5 ml CDCl₃



Assign.	Shift (ppm)
A	7.286
B	7.145
C	4.704
D	3.421

(Замечание: Ошибки поиска, отсутствие части данных снижает оценку, дублирование веществ не допускается)