

Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Оренбургский государственный университет»

Е. А. Строганова, П. А. Пономарева, М. А. Киекпаев

ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Практикум

Часть 3

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ УФ, ИК И ПМР СПЕКТРОСКОПИИ В
СТРУКТУРНОМ АНАЛИЗЕ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Рекомендовано Ученым советом федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Оренбургский государственный университет» в качестве учебного пособия для студентов, обучающихся по программам высшего профессионального образования по специальности 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и направлению подготовки 020100.62 Химия

Оренбург
2013

УДК 547:543.5 (075.8)

ББК 24.2я73+24.46я73

О64

Рецензенты

профессор, доктор физико-математических наук М. Г. Кучеренко

доцент, кандидат биологических наук М. Ю. Гарицкая

О64

Органическая химия : Практикум. Ч. 3. Применение методов УФ, ИК и ПМР спектроскопии в структурном анализе органических соединений / Е. А. Строганова, П. А. Пономарева, М. А. Киекпаев; Оренбургский гос. ун-т. — Оренбург : ОГУ, 2013. — 115 с.
ISBN

Практикум представляет собой руководство к практическим занятиям по органической химии. Третья часть практикума по органической химии посвящена изучению теоретических основ спектральных методов анализа и применению методов УФ, ИК и ПМР спектроскопии в решении структурных задач практического и теоретического характера.

Практикум предназначен для студентов, обучающимся по направлению специальности 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и направлению подготовки 020100.62 Химия

УДК 547:543.5 (075.8)

ББК 24.2я73+24.46я73

ISBN

© Строганова Е.А.,
Пономарева П. А.,
Киекпаев М. А., 2013

© ОГУ, 2013

Содержание

Введение.....	4
1 Физико-химические методы идентификации органических соединений.....	6
1.1 Общие положения спектроскопии.....	7
1.2 Основы электронной спектроскопии.....	10
1.3 Основы ИК спектроскопии.....	14
1.4 Практические вопросы ИК спектроскопии.....	22
1.4.1 Особенности конструкции ИК спектрометров.....	22
1.4.2 Подготовка образцов.....	24
1.4.3 Определение водородных связей.....	30
1.5 Основы спектроскопии ЯМР.....	31
1.6 Протонный парамагнитный резонанс.....	36
2 Лабораторная работа. Определение структуры органических соединений по данным УФ, ИК и ПМР спектроскопии.....	40
Список использованных источников.....	65
Приложение А. Справочные данные по ИК спектроскопии органических и неорганических соединений.....	67
Приложение Б. Справочные данные по ПМР спектроскопии органических соединений.....	114

Введение

Наиболее надежными методами в структурном анализе, позволяющими получить информацию о природе и локализации функциональных групп, строении углеводородного скелета, а также пространственной изомерии соединения являются спектральные методы. Помимо высокой информативности существенным преимуществом этих методов является экспрессность анализа и очень малые затраты вещества.

Наибольшее распространение в органической химии получили методы электронной (УФ) спектроскопии, инфракрасной спектроскопии и ядерного магнитного резонанса (как разновидность – метод протонного парамагнитного резонанса).

Метод электронной спектроскопии основан на поглощении веществом энергии в ультрафиолетовой и видимой областях спектра, расходуемой на возбуждение валентных электронов и перестройку внешней электронной оболочки. Электронная спектроскопия дает информацию о наличии и природе хромофорных групп и сопряженных связей.

Метод ИК спектроскопии основан на поглощении веществом энергии в инфракрасной области спектра. Энергии ИК диапазона достаточно для совершения колебаний связей молекулы вещества, поэтому метод ИК спектроскопии называют еще методом колебательной спектроскопии. Применение данного метода анализа позволяет получить информацию о наличии в соединении различных функциональных групп, их ориентировочном расположении в молекуле вещества, а также предварительные данные о конфигурации и строении углеродного скелета молекулы.

Метод ПМР спектроскопии основан на поглощении веществом энергии в области радиочастот, которая расходуется на переориентацию спинов ядер атомов водорода во внешнем магнитном поле. Информативная ценность спектроскопии ПМР базируется на том, что протон в зависимости от электронного окружения

поглощает излучение различных частот, так как в разной степени экранируется магнитными полями окружающих электронов, а также дает спектральные полосы различной расщепленности в результате спин-спинового взаимодействия с ядрами водорода и иного электронного окружения. По смещению резонансной частоты поглощения под влиянием электронного окружения протонов (химическому сдвигу) определяют расположение электронодонорных и электроноакцепторных групп относительно основного углеводородного скелета молекулы, а по расщепленности сигнала определяют количество соседних атомов водорода и иного электронного окружения и, как следствие, изомерию углеродного скелета.

Настоящая часть практикума по органической химии «Применение методов УФ, ИК и ПМР спектроскопии в структурном анализе органических соединений» посвящена рассмотрению теоретических основ выше обозначенных методов (раздел 1), а также решению практических задач по расшифровке спектров и определению структуры веществ с известной молекулярной формулой (раздел 2). В практикуме приведены справочные данные по характеристическим частотам ИК поглощения функциональных групп, а также наиболее часто используемых растворителей и материалов кювет (приложение А). В приложении Б приведены данные по химическим сдвигам резонансных сигналов протонов некоторых групп во внешнем магнитном поле.