



**Томский государственный университет**  
**Кафедра органической химии**

# **СПЕКТРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

*Учебно-методическое пособие*

Томск  
2014

РАССМОТРЕНО И УТВЕРЖДЕНО методической комиссией химического факультета Томского государственного университета  
Протокол № 13 от 27 января 2014 г.

Председатель методической  
комиссии ХФ, доцент



В.В. Хасанов

Учебно-методическое пособие способствует формированию умения анализировать электронные и колебательные спектры органических соединений, позволяет освоить методы подготовки соединений к снятию спектров и методы снятия спектров.

Для студентов, обучающихся по направлению – 04.03.01 (химия) и по специальности – 04.05.01 (фундаментальная и прикладная химия).

### **Составители:**

**профессор Г.Л. Рыжова, доцент Б.С. Прялкин**

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Лабораторный практикум по спектральным методам анализа и исследования органических соединений, в том числе и природных органических соединений, содержит список основных лабораторных и полупромышленных приёмов исследования и анализа, которыми студенты должны овладеть. Данный практикум предусматривает выполнение таких работ, которые могут демонстрировать прикладное значение лекционного курса, а также содержат дополнительные материалы, которые используются при подготовке бакалавров, специалистов и магистров по органической химии, а также элементы научного исследования.

Практикум будет способствовать повышению качества подготовки специалистов всех уровней по органической химии, а главное – освоению и приобретению практических навыков по методам анализа и исследования соединений с применением колебательной и электронной спектроскопии. Такие специалисты нужны в любых лабораториях, где проводят анализы органических соединений для любых целей, будь то анализы для криминалистической экспертизы, сертификации медпрепаратов, пищевых продуктов, для целей технического контроля (ОТК) и т.д.

## ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ

Лабораторный практикум состоит из 3 разделов.

**Первый раздел.** Практикум, включающий работы по применению УФ и видимых спектров для исследования и анализа органических соединений.

**Второй раздел.** Практикум, включающий работы по применению ИК и КР спектроскопии для анализа и исследования органических соединений.

**Третий раздел.** Работы, включающие приёмы обработки любых спектров.

### Первый раздел

1. Проверка выполнения закона Бугера–Ламберта–Бера с помощью электронных спектров.

2. Количественное определение каротиноидов в природном органическом сырье (на примере сапропеля озера Карасёвое Томской области).

3. Количественное определение концентраций *o*-, *m*-, *n*-нитро-фенолов при их совместном присутствии в растворе.

4. Изучение влияния растворителей при межмолекулярном взаимодействии: реакции протонизации органических соединений с гетероатомами в протонных и апротонных растворителях.

5. Изучение межмолекулярного взаимодействия молекул с электроноакцепторными заместителями с молекулами, содержащими электронодонорные заместители в видимой части спектра.

## **Второй раздел**

1. Применение ИК спектроскопии для функционального анализа трёх соединений, которые содержат: 1) акцепторную группу; 2) донорную группу; 3) акцепторную и донорную группы.

2. Применение ИК спектроскопии для идентификации органических соединений из природного органического сырья (сапрпель озера Карасёвое Томской обл.) на примере гуминовых, гемато-мелановых и фульвеновых кислот.

3. Количественный анализ индивидуальных органических соединений на примере двух соединений (фенола и анилина).

4. Применение ИК спектроскопии для изучения межмолекулярного взаимодействия (водородные связи) на примере фенола и анилина.

5. Определение констант образования комплексных соединений.

## **Третий раздел**

1. Молекулярная механика. Лабораторная работа с использованием спектров электронной и колебательной спектроскопии, и теоретических подходов к анализу органического соединения.

2. Анализ структуры полос спектров.

## **Литература к лабораторным работам**

1. Прялкин Б.С. Лабораторный практикум по физико-химическим методам исследования органических соединений. Аппроксимация контура сложных спектров набором математических функций: учебно-методическое пособие. Томск : ТГУ, 2005. Вып. 6. 26 с.

2. Прялкин Б.С. Лабораторный практикум по физико-химическим методам исследования органических соединений. Молекулярная механика: учебно-методическое пособие. Томск : ТГУ, 2005. Вып. 5 26 с.

3. Дворкин П.Л., Прялкин Б.С. Применение ЭВМ в лабораторном практикуме по физико-химическим методам исследования соединений. Молекулярная механика. Томск : ТГУ, 1987. Вып. 5. 23 с.

## ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

### 1. Электронная спектроскопия

- 1.1. Приборы, техника эксперимента, теория УФ спектроскопии.
  - 1.1.1. Блок-схема электронного спектрофотометра.
  - 1.1.2. Типы монохроматоров электронного спектрофотометра.
  - 1.1.3. Источники излучения электронного спектрофотометра.
  - 1.1.4. Фазовое состояние вещества для изучения электронного спектра.
  - 1.1.5. Требования предъявляемые к растворителям применяемых в электронной спектроскопии.
  - 1.1.6. Природа электронных спектров поглощения и излучения.
  - 1.1.7. Основные характеристики органических веществ в УФ спектрах.
  - 1.1.8. Классификация электронных переходов.
  - 1.1.9. Спектры поглощения алканов.
  - 1.1.10. Спектры поглощения алкенов.
  - 1.1.11. Спектры поглощения алкинов.
  - 1.1.12. Спектры поглощения ароматических углеводов.
  - 1.1.13. Спектры поглощения гетероатомных соединений, имеющие  $n \rightarrow \pi$  переходы.
  - 1.1.14. Спектры поглощения органических соединений, имеющие электронно-донорные и электронно-акцепторные заместители.
  - 1.1.15. Подходы при рассмотрении полос поглощения замещённых бензолов, как возмущённых полос бензольного кольца.
  - 1.1.16. Подходы при рассмотрении полос поглощения замещённых бензолов с позиции переноса заряда между заместителями и фенильным кольцом.
- 1.2. Применение электронной спектроскопии
  - 1.2.1. Применение электронных спектров для анализа одно-, двух-, трёх- и других многокомпонентных систем.
  - 1.2.2. Использование электронных спектров для определения констант ионизации (констант кислотности и основности).
  - 1.2.3. Изосбестические точки в электронных спектрах и их применение для определения примесей.
  - 1.2.4. Проявление водородных связей и образования молекулярных комплексов в электронных спектрах поглощения.
  - 1.2.5. Методы определения констант равновесия комплексов.
  - 1.2.6. Применение электронных спектров для определения состава комплексов различного стехиометрического состава.
  - 1.2.7. Изучение электронных спектров интермедиатов в реакциях.
  - 1.2.8. Изучение влияния растворителей на сольватационные процессы при поглощении.

1.2.9. Влияние полярных и неполярных растворителей на электронные спектры алканов.

1.2.10. Влияние растворителей разной полярности на электронные спектры алкенов.

1.2.11. Влияние растворителей разной полярности на электронные спектры алкинов.

1.2.12. Влияние растворителей разной полярности на электронные спектры ароматических углеводородов.

1.2.13. Закон Бугера-Ламберта-Бера. Условия его выполнения и природа отклонений от закона.

1.2.14. Области применения флуоресценции.

1.2.15. Области применения фосфоресценции.

1.2.16. Хромофоры и аукохромы. Применение этих терминов к объяснению поглощения органических веществ.

## **2. Колебательная спектроскопия**

2.1. Приборы, техника эксперимента, теория ИК- и КР- спектроскопии.

2.1.1. Блок-схема ИК-спектрофотометра.

2.1.2. Блок-схема КР-спектрофотометра.

2.1.3. Типы монохроматоров спектрофотометров для исследования спектров в ИК области.

2.1.4. Источники излучения инфракрасных спектрофотометров.

2.1.5. Природа полос поглощения ИК-спектров.

2.1.6. Природа полос излучения спектров комбинационного рассеяния.

2.1.7. Техника Фурье-преобразования в колебательной спектроскопии.

2.1.8. Правила отбора полос в ИК- и КР-спектроскопии.

2.1.9. Метод нарушенного полного внутреннего отражения.

2.1.10. Расчёт колебательных спектров. Метод молекулярной механики. Достоинства и недостатки.

2.1.11. Расчёт колебательных спектров. Метод гармонического осциллятора. Ошибки, связанные с ангармоничностью колебаний.

2.1.12. Расчёт колебательных спектров. Системы координат в расчётах колебательных спектров – декартовы и нормальные координаты.

2.1.13. Расчёт колебательных спектров. Расчёт при различных амплитудах колебаний.

2.1.14. Расчёт прямой колебательной задачи.

2.1.15. Расчёт обратной колебательной задачи.

2.1.16. Форма, характеристичность нормальных колебаний. Что эти параметры характеризуют?

1.2. Применение колебательной спектроскопии.

2.2.1. Применение колебательных спектров для решения практических задач в органической химии.

2.2.2. Колебательные спектры предельных углеводов. Форма и характеристичность этих колебаний.

2.2.3. Колебательные спектры непредельных углеводов. Форма и характеристичность этих колебаний.

2.2.4. Колебательные спектры ацетиленовых углеводов. Форма и характеристичность этих колебаний.

2.2.5. Колебательные спектры ароматических углеводов. Форма и характеристичность этих колебаний.

2.2.6. Колебательные спектры органических соединений, содержащих карбонильные группы (альдегиды, кетоны, карбоновые кислоты). Форма и характеристичность этих колебаний.

2.2.7. Колебательные спектры органических соединений, содержащих карбонильные группы (производные карбоновых кислот – эфиры, амиды, ангидриды). Форма и характеристичность этих колебаний.

2.2.8. Влияние массы атомов и геометрии молекул на колебательные спектры.

2.2.9. Валентные колебания X–H связей (X – азот, кислород, сера, фосфор).

2.2.10. Проявление водородных связей в колебательных спектрах.

2.2.11. Закон Бугера–Ламберта–Бера. Условия его выполнения и природа отклонений от закона.

2.2.12. Пиковая интенсивность, интегральная интенсивность. Методы определения.

2.2.13. Полуколичественные методы оценки интенсивности полос ИК спектров.

2.2.14. Особенности колебательных спектров твёрдых органических соединений.

2.2.15. Особенности колебательных спектров жидких органических соединений.

2.2.16. Особенности колебательных спектров органических соединений в газовой фазе.

### **3. Сопоставьте строение соединения с его УФ спектром.**

3.1. На рис. 1 приведены спектры: аллилбензола  $C_6H_5-CH_2-CH=CH_2$ ,

1-фенилпропен-1  $C_6H_5-CH=CH-CH_3$ , и

1-фенилпентадиена-1,3  $C_6H_5-CH=CH-CH=CH_2-CH_3$ .

К какому соединению принадлежит каждая кривая поглощения в электронном спектре?

3.2. Какая из кривых А или Б, приведённых на рис. 2, принадлежит к  $\alpha$ -иرونу (I, 5-метил- $\alpha$ -ионон) и  $\beta$ -иرونу (II, 5-метил- $\beta$ -ионон).

3.3. На рис. 3 приведены спектры 2-нафтола и 2-нафтилкарбинола. Какому соединению принадлежит каждая кривая?

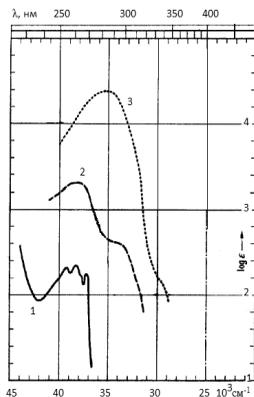


Рис. 1. Электронные спектры производных бензола

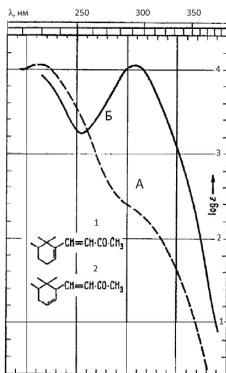


Рис. 2. Электронные спектры  $\alpha$ - и  $\beta$ -ионов

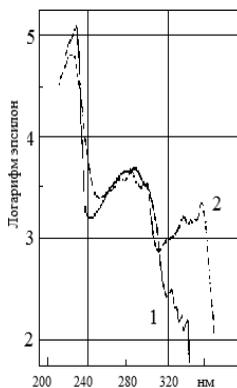


Рис. 3. Спектры производных нафталина

3.4. Объясните различия в спектрах, приведённых для следующих веществ: I – 2,2'-диметилдифенил, II – 3,3'-диметилдифенил, III – 4,4'-диметилдифенил, IV – 2,2',3,3',4,4'-гексаметилдифенил (рис. 4).

3.5. На рис. 5 приведены спектры 2,2'-дихлордифенила и 4,4'-дихлордифенила. Какому соединению соответствует каждая кривая?

3.6. На рис. 6 представлены спектры поглощения фенола в растворе *n*-гексана, спирта и в водном растворе. Какому растворителю соответствует каждая кривая?

3.7. Спектр ацетона (рис. 7) снят в растворе *n*-гексана, этанола и воды. Какому растворителю соответствует каждая кривая?

3.8. Спектр пиразина (1,4-диазин) изменяется при изменении полярности растворителя, как это показано на рис. 8. Определите, какой спектр соответствует раствору в воде и в циклогексане, и объясните происходящие изменения.

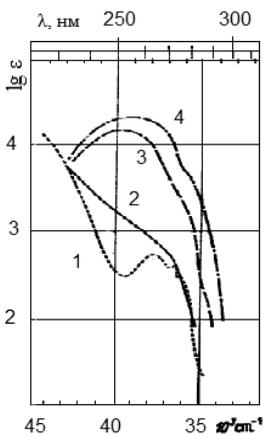


Рис 4. Спектры метильных производных дифенила

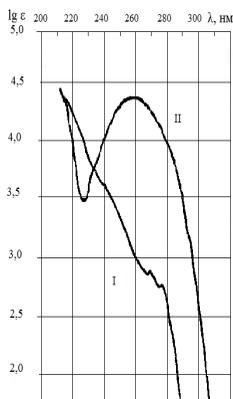


Рис 5. Спектры дихлор производных дифенила

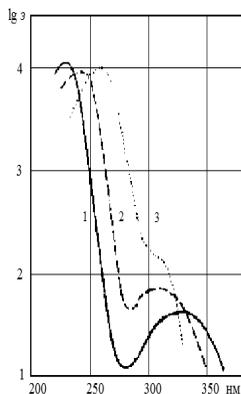


Рис 6. УФ-спектр окиси мезитила: 1 – в гептане, 2 – этаноле, 3– воде

3.9. Определите, какому из растворителей (*n*-гексану, этиловому спирту или воде) соответствует каждая кривая поглощения окиси мезитила (4-метилпентен-3-он-2), представленная на рис. 9. Объясните изменения, наблюдаемые в спектрах.

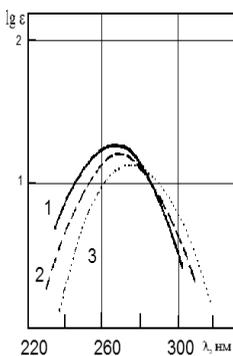


Рис 7. УФ спектры фенола

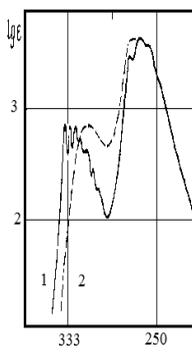


Рис 8. Спектры пиразина

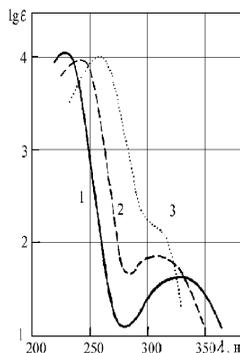


Рис 9. Спектры окиси мезитила: 1 – в гептане, 2 – этаноле, 3– воде

3.10. На рис. 10 приведены спектры  $\alpha$ -нафтиламина в спиртовом растворе и в кислом водно-спиртовом растворе. Какому растворителю соответствует каждая кривая?

3.11. *o*-Аминофенол в этанольном растворе имеет спектр, приведённый на рис. 11 (I). На том же рисунке даны спектры *o*-аминофенола в кислом и щелочном водных растворах. Определите, какому растворителю соответствует каждая кривая поглощения.

3.12. 2-Аминоантрацен в (нафталин) растворе этанола имеет спектр, представленный на рис. 12 (I). В каком растворителе следует снять спектр 2-аминоантрацена, чтобы получить кривую 2?

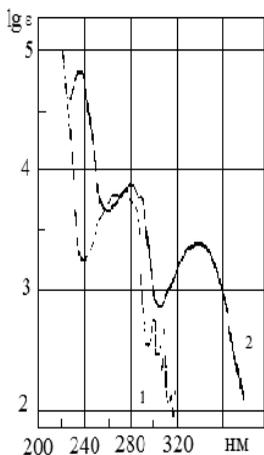


Рис. 10. УФ спектр  $\alpha$ -нафтиламина

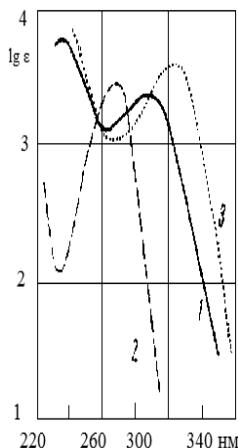


Рис. 11. УФ спектры *o*-аминофенола

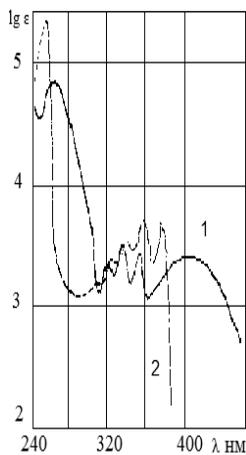
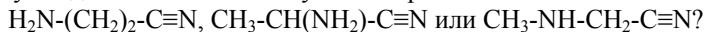


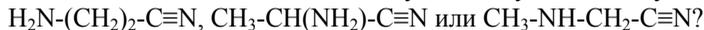
Рис. 12. УФ спектры 2-аминоантрацена

#### 4. Сопоставьте строение вещества с его ИК спектром

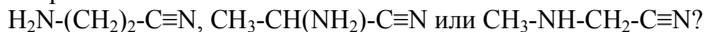
4.1. В ИК спектре соединения имеются полосы 3470, 3380, 2250, 2970 и 2895  $\text{см}^{-1}$  и нет других полос поглощения в области 2000–3500  $\text{см}^{-1}$ . Какому соединению соответствует спектр:



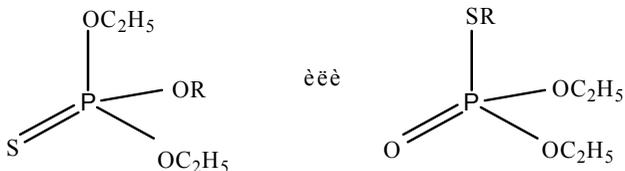
4.2. В ИК спектре имеются полосы 3400, 2970, 2250  $\text{см}^{-1}$  и нет других полос в области 2000–3500  $\text{см}^{-1}$ . Какому веществу соответствует спектр:



4.3. В ИК спектре имеются полосы 3470, 3380, 2930, 2850, 2250  $\text{см}^{-1}$  и нет других полос в области 2000–3500. Какому веществу соответствует этот спектр:



4.4. Какой формуле отвечает соединение, если в ИК спектре найдена частота 1280  $\text{см}^{-1}$  и отсутствует поглощение в области 600–700  $\text{см}^{-1}$ :



4.5. Какова формула вещества  $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$  или  $\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}$ , если в ИК спектре имеются полосы  $1725$ ,  $3500$  и  $900 \text{ см}^{-1}$ ?

4.6. Какой формуле отвечает соединение, если в ИК спектре обнаружены частоты  $1650$ ,  $1710$ ,  $3350 \text{ см}^{-1}$ . В области валентных колебаний C-H имеются полосы  $2970$ ,  $2930$ ,  $2870$  и  $2850 \text{ см}^{-1}$ :

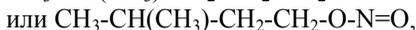
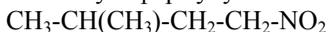


4.7. В ИК спектре имеются полосы  $2250$ ,  $3600 \text{ см}^{-1}$ . В области валентных колебаний C-H наблюдается поглощение при  $2970$ ,  $2870$ ,  $2895 \text{ см}^{-1}$ . Какому соединению соответствует этот спектр:



4.8. Какова формула вещества, если в ИК спектре имеются полосы  $1740$ ,  $2800$  и  $960 \text{ см}^{-1}$ :  $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$  или  $\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}$ ?

4.9. Какую формулу имеет соединение



если в его спектре обнаружены частоты  $2970$ ,  $2930$ ,  $2870$ ,  $2850$ ,  $1653$  и  $1613 \text{ см}^{-1}$ ?

4.10. При окислении диметилсульфида  $\text{CH}_3\text{-S-CH}_3$  может получиться два продукта – сульфоксид  $\text{CH}_3\text{-SO-CH}_3$  или сульфон  $\text{CH}_3\text{-SO}_2\text{-CH}_3$ .

В ИК спектре продукта окисления имеется полоса  $1045 \text{ см}^{-1}$  и нет полос в области  $1120\text{--}1160$  и  $1300\text{--}1350 \text{ см}^{-1}$ . Какой продукт получился?

4.11. Какой продукт получился при окислении диметилсульфида  $\text{CH}_3\text{SCH}_3$ : диметилсульфоксид  $\text{CH}_3\text{-SO-CH}_3$  или диметилсульфон  $\text{CH}_3\text{-SO}_2\text{-CH}_3$ , если в ИК спектре найдены полосы  $1320$  и  $1150 \text{ см}^{-1}$  и отсутствуют полосы в области  $1030\text{--}1070 \text{ см}^{-1}$ .

4.12. Какой формуле отвечает нитросоединение:

$\text{CH}_3\text{-CH(OH)-NO}_2$  или  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-NO}_2$ , если в ИК спектре найдены частоты  $3600$ ,  $1550$ ,  $1370$ ,  $2970$ ,  $2870$  и  $2895 \text{ см}^{-1}$ .

4.13. Какой формуле отвечает нитросоединение:

$\text{CH}_3\text{-CH(OH)-NO}_2$  или  $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-NO}_2$ , если в ИК спектре найдены частоты  $1630$ ,  $1280$ ,  $2970$ ,  $2870$ ,  $2930$  и  $2850 \text{ см}^{-1}$ .

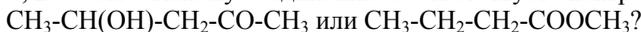
4.14. Какой формуле отвечает соединение:

$(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{Sn-C}\equiv\text{C-CH=CH}_2$  или  $(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{Sn(CH=CH}_2\text{)(CH=CH-C}_2\text{H}_5\text{)}$ , если в ИК спектре найдены частоты:  $2136$  и  $1591 \text{ см}^{-1}$ .

4.15. В ИК спектре найдены полосы 1630, 3450, 3370, 2970, 2870, 2850  $\text{см}^{-1}$ . Какому соединению соответствует спектр:



4.16. В ИК спектре найдены полосы 1705, 3600, 2970, 2870, 2930, 2850, 2895  $\text{см}^{-1}$ . Какому соединению соответствует спектр:

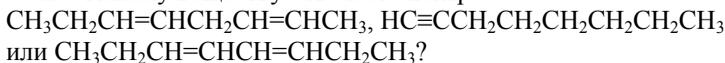


4.17. В ИК спектре найдены полосы 1740, 2979, 2870, 2930 и 2850  $\text{см}^{-1}$ .

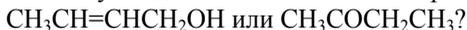
Какому соединению отвечает спектр:



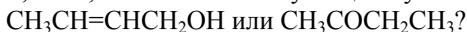
4.18. В ИК спектре наблюдаются полосы 1382, 1465, 2860, 2950, 2120, 3300  $\text{см}^{-1}$ . Какому веществу отвечает спектр:



4.19. В ИК спектре наблюдаются полосы 1380, 1468, 2860, 2950, 1710  $\text{см}^{-1}$ . Какому соединению отвечает спектр:



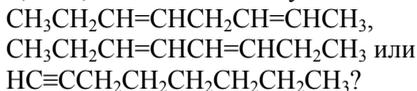
4.20. В ИК спектре наблюдаются полосы 970, 1380, 1468, 1640, 2860, 2950, 3030, 3400  $\text{см}^{-1}$ . Какому веществу отвечает спектр:



4.21. В ИК спектре наблюдаются полосы 1382, 1465, 1600, 2860, 2950  $\text{см}^{-1}$ . Какому соединению отвечает спектр:

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_3$ ,  $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$  или  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}=\text{CHCH}_2\text{CH}_3$ ?

4.22. В ИК спектре наблюдаются полосы 960, 1382, 1464, 1640, 2860, 2950, 3100  $\text{см}^{-1}$ . Какому соединению отвечает спектр:



4.23. В ИК спектре найдены полосы 1650, 2870, 2970  $\text{см}^{-1}$ . Какому соединению отвечает спектр:



4.24. В ИК спектре найдены полосы 1680, 2850, 2870, 2930, 2970, 3450  $\text{см}^{-1}$ . Какому соединению отвечает спектр:



## 5. Совместное использование электронных и колебательных спектров

5.1. Установить строение соединения по информации о спектрах соединений.

5.1.1. Определите строение соединения  $C_7H_9N$ , УФ спектр которого приведен на рис. 13. В ИК-спектре его имеются резкие полосы поглощения при  $3480$  и  $3390\text{ см}^{-1}$ .

5.1.2. В ИК спектре соединения  $C_7H_9N$  имеются две резкие полосы поглощения в области  $3500\text{--}3300\text{ см}^{-1}$ . УФ спектр соединения приведён на рис. 14. Определите структуру этого соединения.

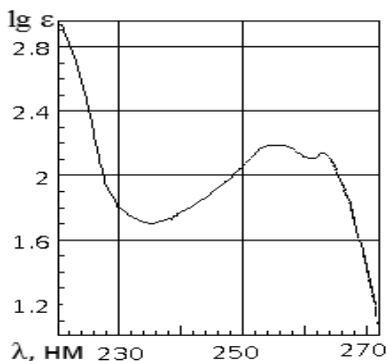


Рис. 13. Соединения  $C_7H_9N$  (5.1.1)

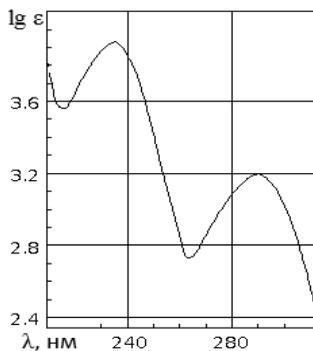


Рис. 14. Соединения  $C_7H_9N$  (5.1.2)

5.1.3. К какому классу относятся соединения  $C_4H_8O$ , если первое имеет полосу при  $1710\text{ см}^{-1}$  и в УФ спектре поглощает при  $280\text{ нм}$  ( $\lg \epsilon = 1.2$ ), а второе – полосу при  $1732\text{ см}^{-1}$  и поглощение при  $292\text{ нм}$  ( $\lg \epsilon = 1.2$ ).

5.1.4. Два соединения имеют состав  $C_{14}H_{14}O$ . В ИК спектрах обоих отсутствует поглощение в области  $3200\text{--}3600\text{ см}^{-1}$  и имеется полосы  $3000, 1600, 1500\text{ см}^{-1}$ , характерные для ароматического кольца. УФ спектры соединений (рис. 15) различаются между собой. Определите строение этих соединений. Какие спектральные характеристики дополнительно можно привести для подтверждения предложенных структур?

5.1.5. Два органических соединения имеющие одинаковую бруттоформулу  $C_7H_{12}O$ , различаются по своим спектральным характеристикам: для первого соединения в ИК спектре интенсивная полоса при  $1718\text{ см}^{-1}$  и полоса средней интенсивности при  $1630\text{ см}^{-1}$ , в его электронном спектре проявляется одна полоса поглощения низкой интенсивности при  $280\text{ нм}$  с  $\lg \epsilon = 1.2$ . Для второго соединения в ИК спектре наблюдаются две интенсивные полосы поглощения при  $1600$  и  $1670\text{ см}^{-1}$ , в его УФ спектре имеются две полосы поглощения – интенсивная с  $\lg \epsilon = 4.1$  и  $\lambda_{\text{макс}} = 220\text{ нм}$  и низкоинтенсивная полоса при  $300\text{ нм}$  с  $\lg \epsilon = 1.5$ .

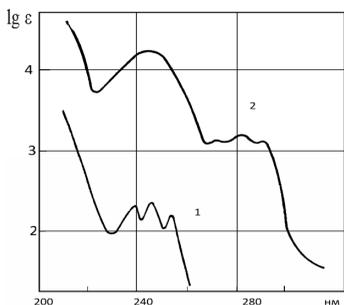


Рис. 15. Соединение  $C_{14}H_{14}O$  (5.1.4)

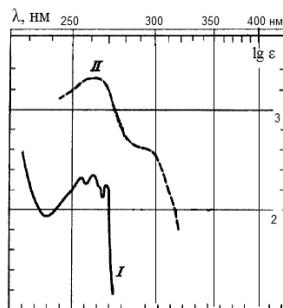


Рис. 16. Соединение  $C_9H_{10}$  (5.1.6)

Какие изменения в строении соединения могут вызвать указанные различия в ИК и УФ спектрах?

5.1.6. Вещество с брутто-формулой  $C_9H_{10}$ , имеющее в ИК спектре поглощение средней интенсивности при  $1650\text{ см}^{-1}$  и обладающее УФ спектром поглощения (рис. 16). Под действием УФ облучения произошла изомеризация. При этом в ИК спектре исчезла полоса при  $1650\text{ см}^{-1}$  и появилось интенсивное поглощение при  $1625\text{ см}^{-1}$ . УФ спектр также существенно изменился: полоса поглощения сместилась bathochromно, а её интенсивность увеличилась (рис. 16). Определите строение исходного соединения и продукта его изомеризации.

5.1.7. Спектры двух соединений, имеющих брутто-формулу  $C_7H_8O$ , отличаются поглощением в области  $3400\text{--}3600\text{ см}^{-1}$ : первое не поглощает в этой области, второе имеет поглощение, характер которого изменяется с изменением концентрации веществ в растворе  $CCl_4$ . УФ спектры этих веществ представлены на рис. 17. Определите структуру соединений и укажите, каков характер ИК спектра этих веществ в области валентных колебаний связи С-Н.

5.1.8. Два соединения, имеющие брутто-формулу  $C_9H_{10}O_2$ , обладают различными спектральными характеристиками. Первое соединение имеет в ИК спектре полосу при  $1720\text{ см}^{-1}$ ; УФ спектр его изображён на рис. 18,1. У второго соединения в ИК спектре проявляется интенсивная полоса поглощения при  $1680\text{ см}^{-1}$  и ему соответствует УФ спектр, представленный на рис. 18,2. В ИК спектрах обоих соединений имеется широкая полоса поглощения в области  $3300\text{--}2500\text{ см}^{-1}$ . Выскажите предположения о структуре соединений и укажите, какие ещё различия имеются в ИК спектрах обсуждаемых соединений.

5.1.9. Определите строение двух соединений, если известно, что они имеют брутто-формулу  $C_8H_8O_2$  и УФ спектры, изображённые на рис 19. В ИК спектре первого соединения есть полоса при  $1718\text{ см}^{-1}$  и широкая

полоса в области  $3000\text{ см}^{-1}$ . В ИК спектре второго соединения имеется широкая полоса  $1720\text{ см}^{-1}$ . Полосы в области  $3000\text{ см}^{-1}$  нет.

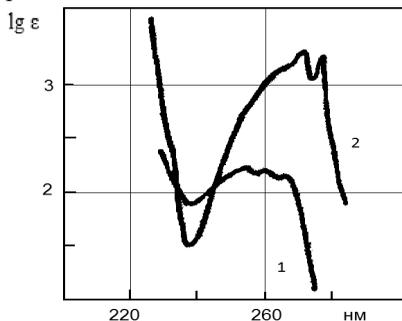


Рис. 17. Соединение  $C_7H_8O$  (5.1.7)

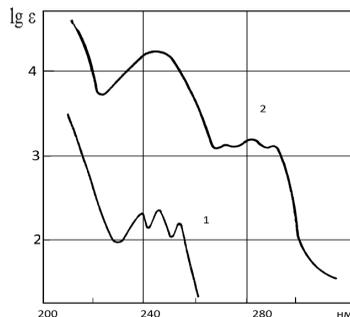


Рис. 18. Соединение  $C_9H_{10}O_2$  (5.1.8)

5.1.10. Какова структура соединений, если известны следующие факты:

а) Из элементного анализа известно, что соединение имеет в своём составе только углерод и водород в соотношении 1:1, 182 у.е. – молекулярный вес. УФ спектр приведён на рис. 20, 1. В ИК спектре содержится полосы, характеризующие бензольное кольцо. Выскажите предположения о структуре соединения.

б) Соединение этого же состава и с теми же спектральными характеристиками в ИК области имеет иной УФ спектр (рис. 20, 2).

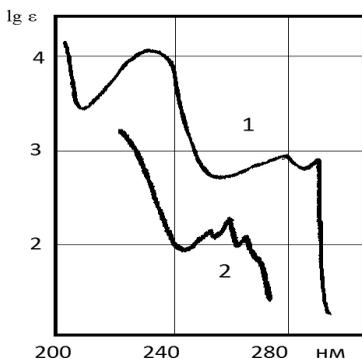


Рис. 19. Соединение  $C_8H_8O_2$  (5.1.9)

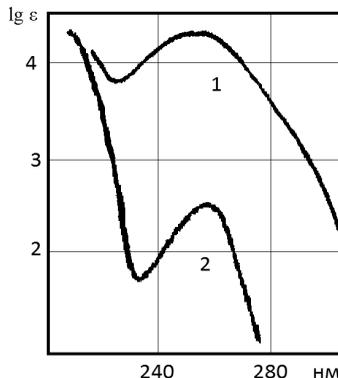


Рис. 20. Соединения  $C_{14}H_{14}$  (5.1.10)

5.1.11. Для двух соединений состава  $C_{13}H_{12}$  в ИК спектре имеются полосы, характеризующие бензольное кольцо. УФ спектры этих соединений различны (рис. 21). Выскажите свои предположения о структуре со-

единений и укажите, какие ещё спектральные характеристики вы могли бы привести для подтверждения предложенных Вами структур.

5.1.12. УФ спектр бензилового эфира фенола (1) представлен на рис. 22. Укажите, какие характерные полосы поглощения будут наблюдаться в ИК спектре этого соединения.

Какова структурная формула соединения (2), имеющего тот же состав  $C_{13}H_{12}O$ , но обладающего иным поглощением в УФ области (рис. 22). В его ИК спектре имеются полосы ароматического кольца и отсутствует поглощение в области  $3300-3600\text{ см}^{-1}$ .

5.2. На основании УФ, ИК и КР спектров установить структуру органических соединений. Приведены рисунки спектров, таблица частот и интенсивностей (%) колебательных спектров.

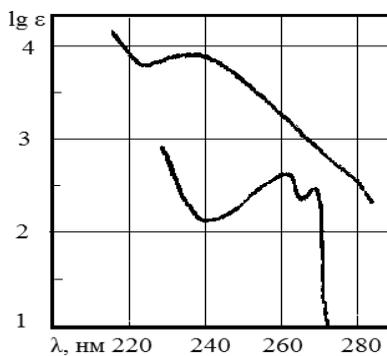


Рис. 21. Соединение  $C_{13}H_{12}$  (5.1.11)

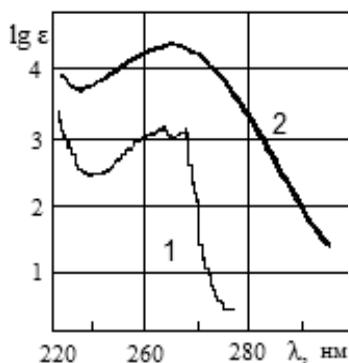
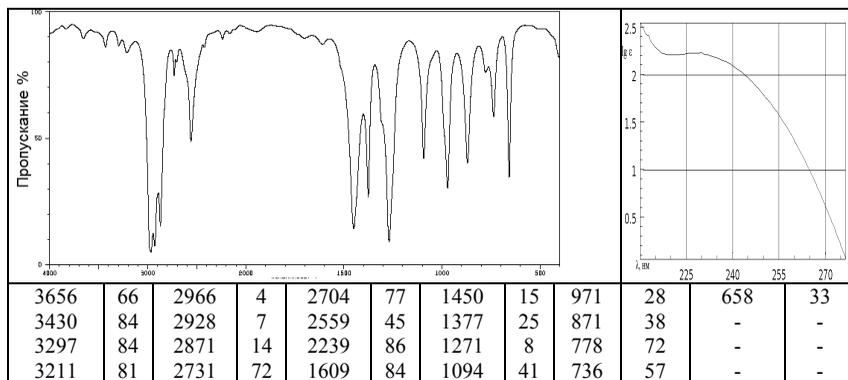
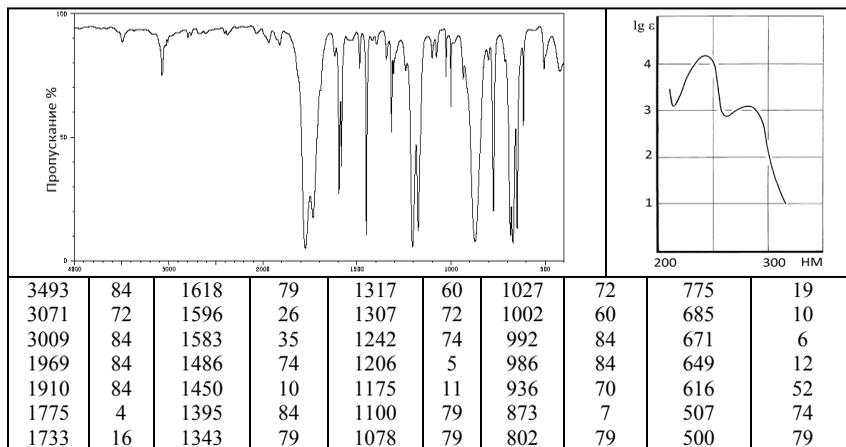


Рис. 22. Соединение  $C_{13}H_{12}$  (5.1.12)

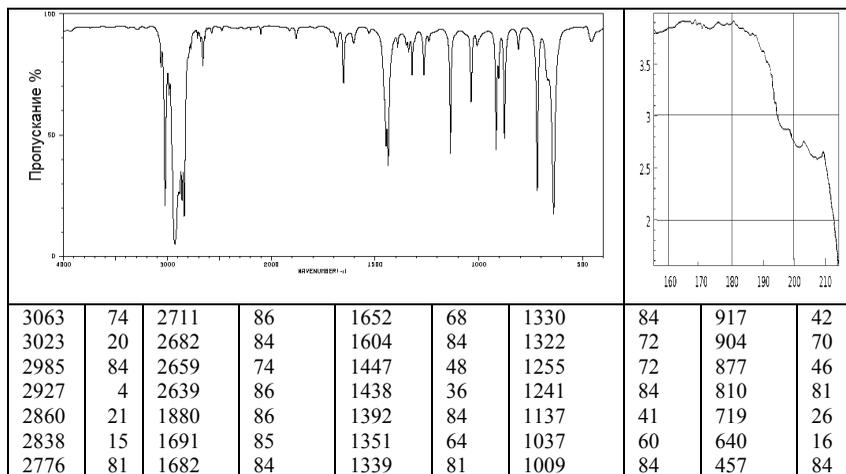
5.2.1. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



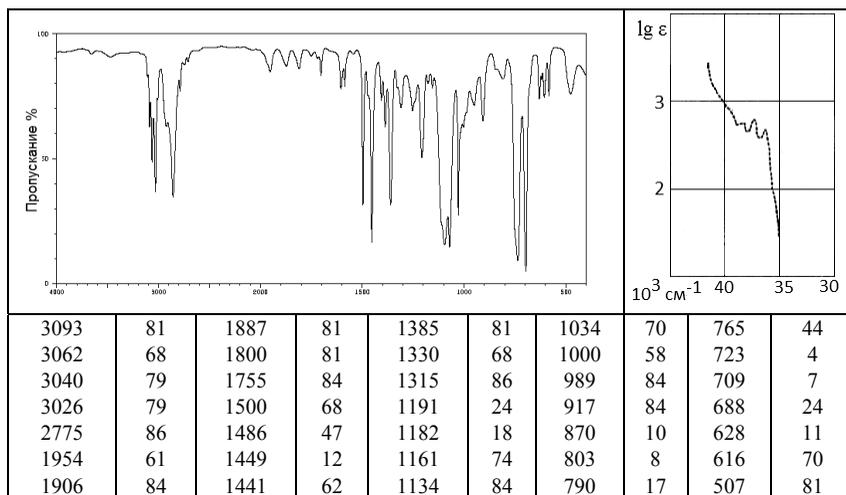
5.2.2. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в *n*-гексане).



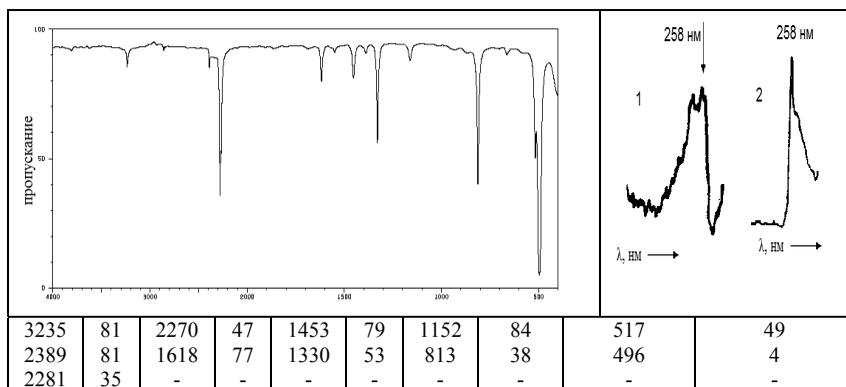
5.2.3. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



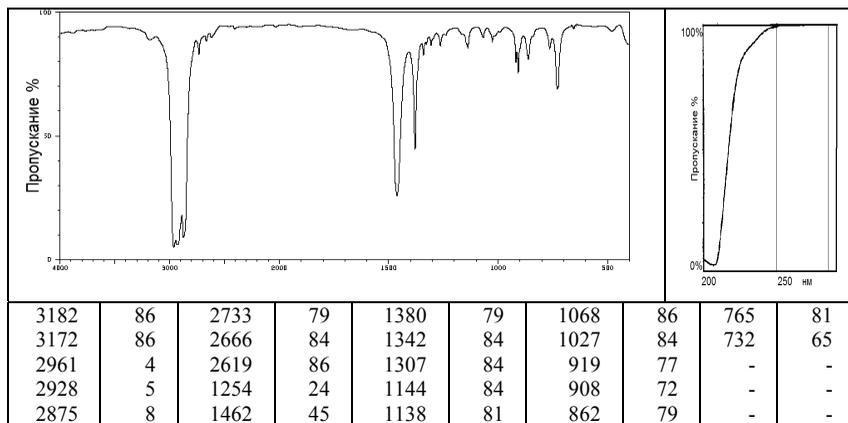
5.2.4. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в *n*-гексане).



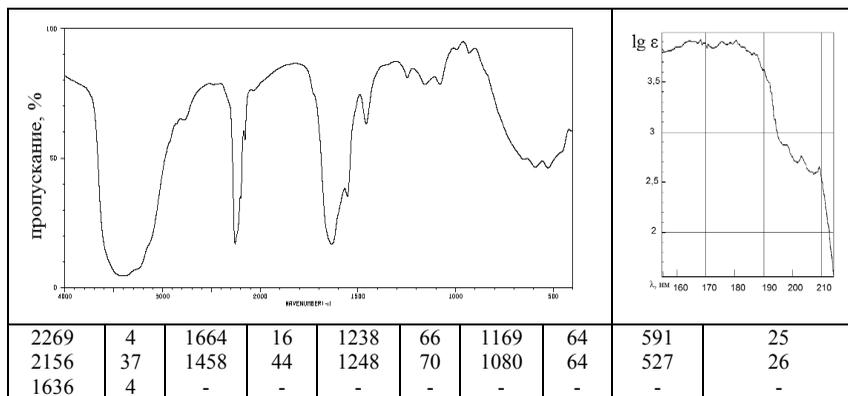
5.2.5. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектрам (1 – кристалл при 20 К, 2 – газовая фаза).



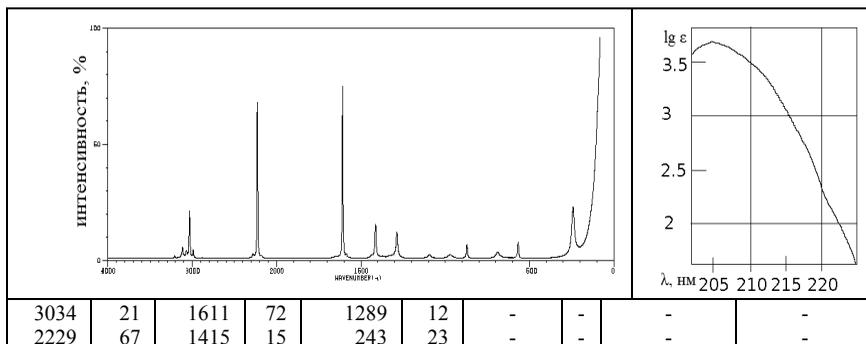
5.2.6. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (кварцевая кювета толщиной 1 см).



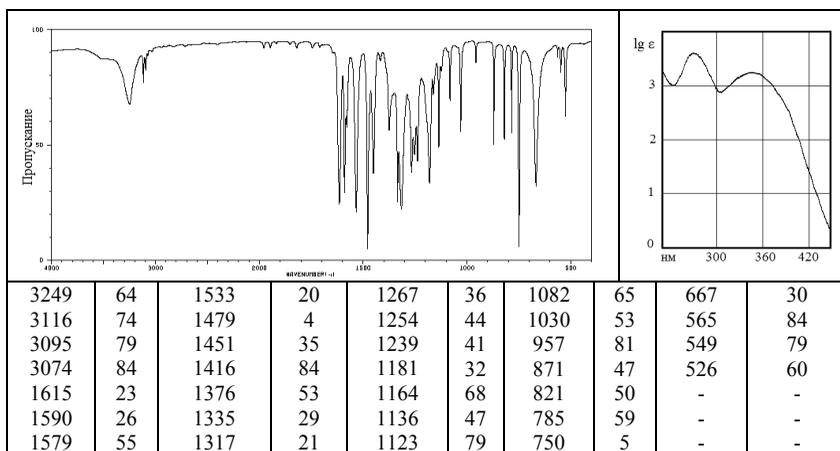
5.2.7. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



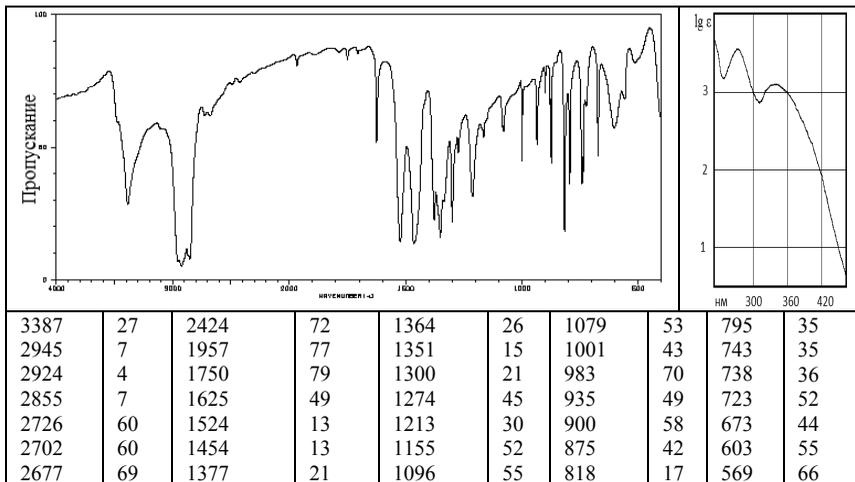
5.2.8. Определите строение органического соединения по КР спектру (жидкий образец) и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



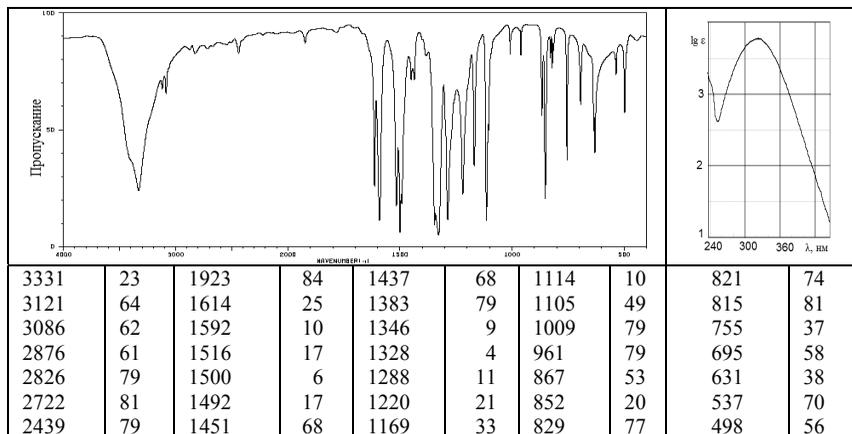
5.2.9. Определите строение органического соединения по ИК спектру (таблетка КВг) вещества и его УФ спектру (раствор в этаноле).



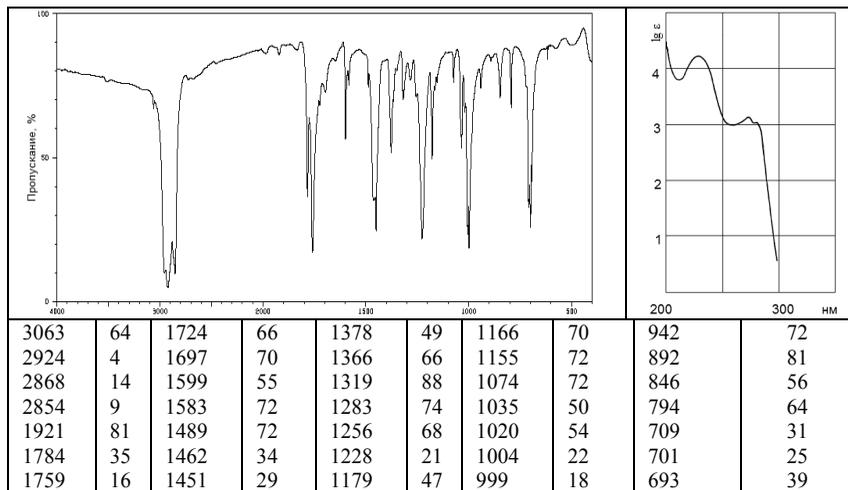
5.2.10. Определите строение органического соединения по ИК спектру (суспензия в вазелиновом масле) вещества и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



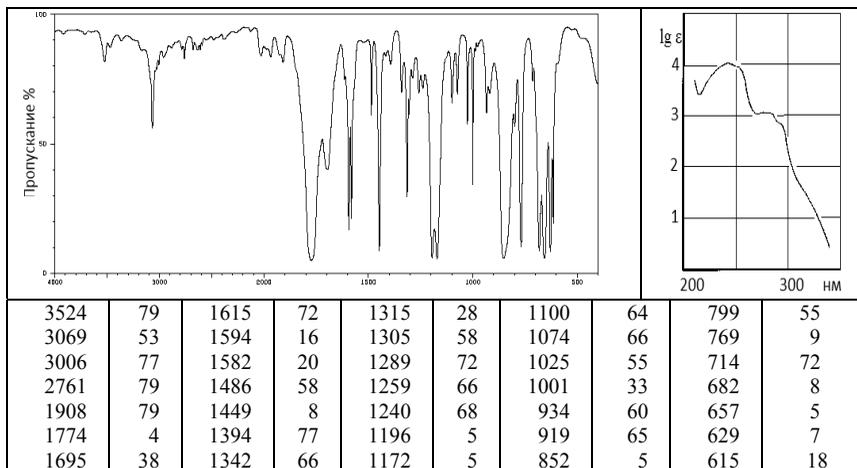
5.2.11. Определите строение органического соединения по ИК спектру (таблетка КВг) вещества и его УФ спектру (раствор в этаноле).



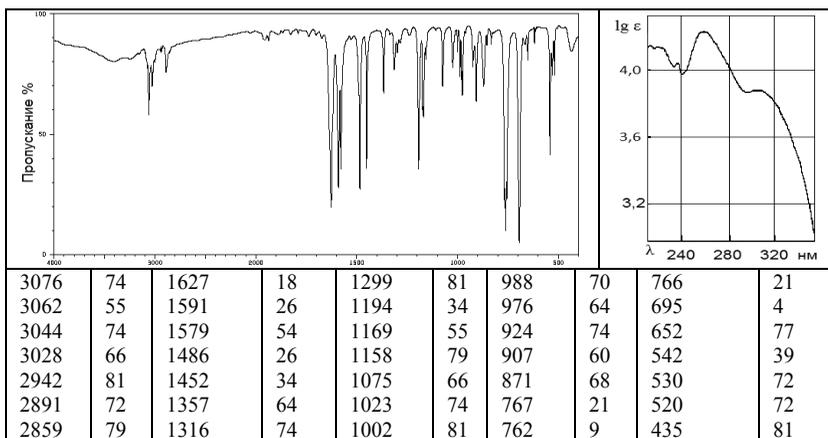
5.2.12. Определите строение органического соединения по ИК спектру (суспензия в вазелиновом масле) вещества и его УФ спектру (раствор в этаноле).



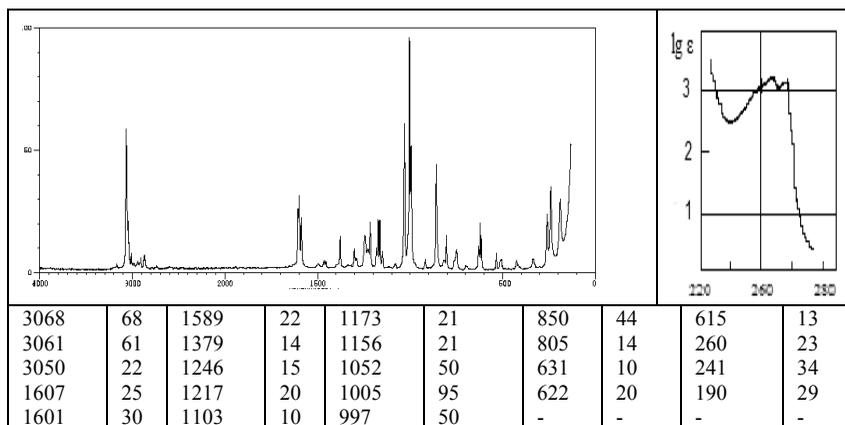
5.2.13. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в *n*-гексане).



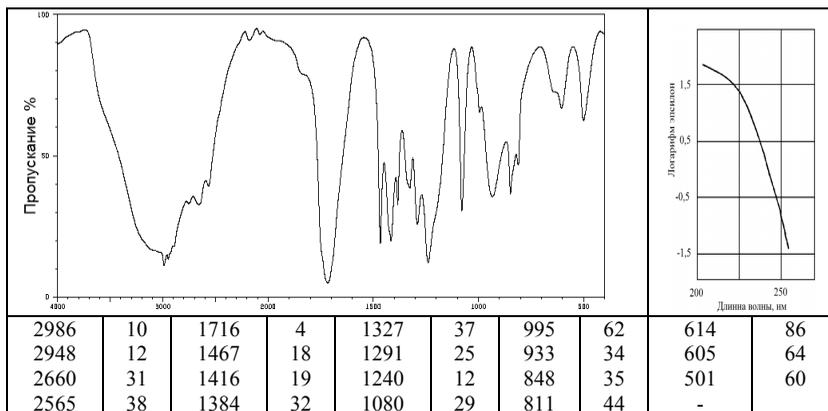
5.2.14. Определите строение органического соединения по ИК спектру (таблетка KBr) вещества и его УФ спектру (раствор в циклогексане).



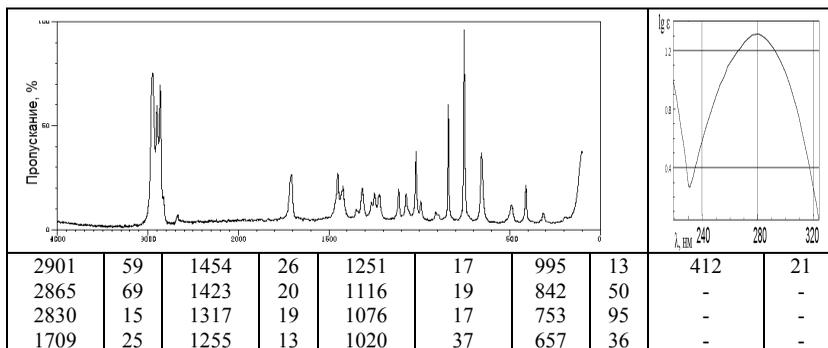
5.2.15. Определите строение органического соединения по КР спектру (порошок) вещества и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



5.2.16. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в воде).

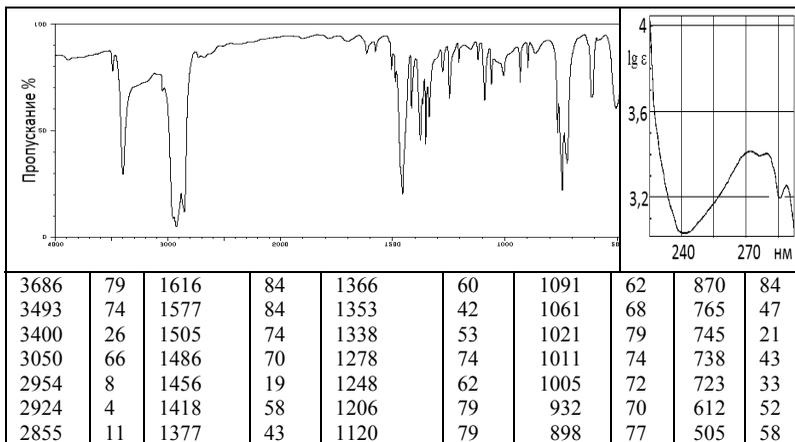


5.2.17. Определите строение органического соединения по КР спектру (жидкий образец) вещества и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).

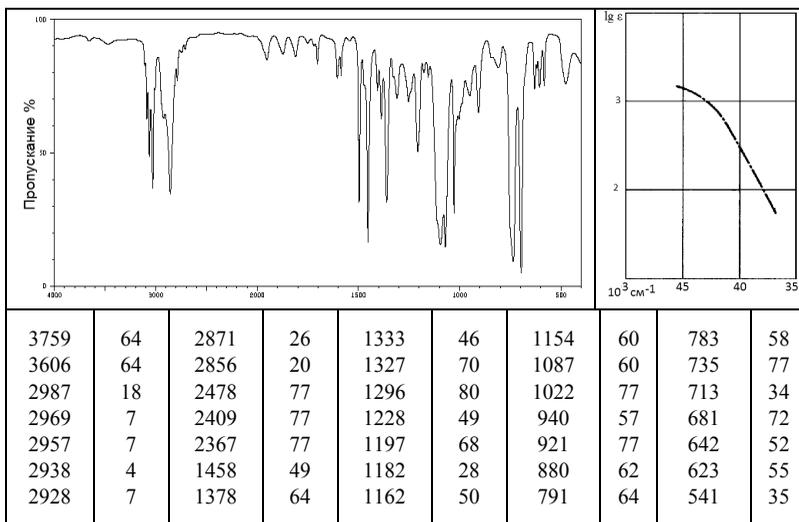




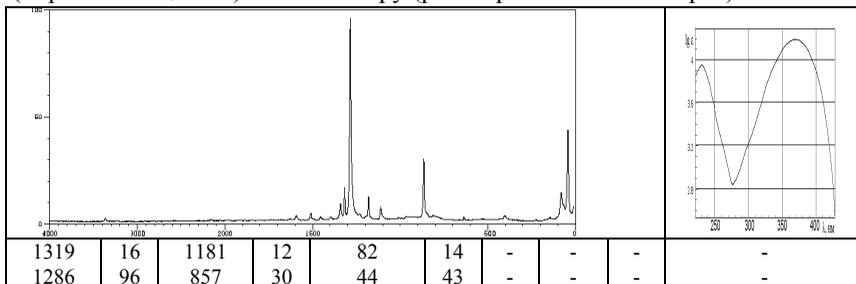
5.2.20. Определите строение органического соединения по КР спектру (суспензия в вазелиновом масле) вещества и его УФ спектру (в растворе метанола).



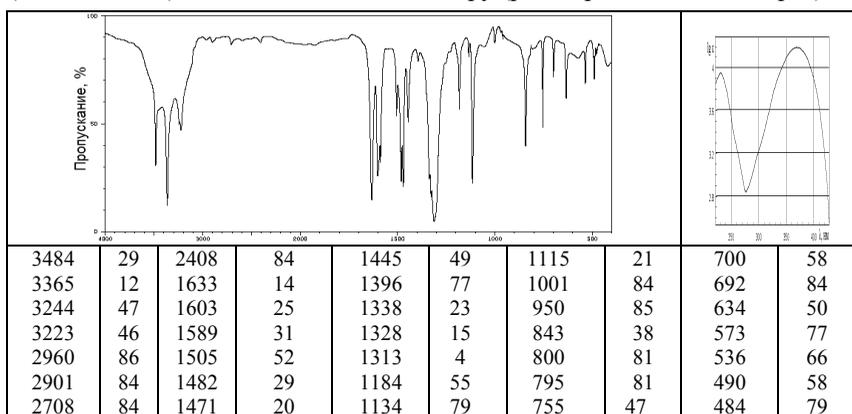
5.2.21. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в *n*-гексане).



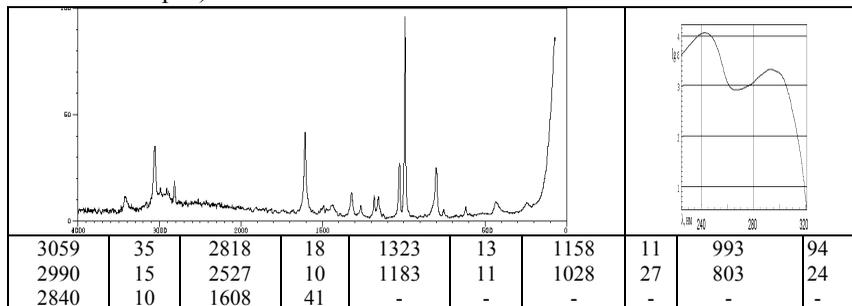
5.2.23. Определите строение органического соединения по КР спектру (порошок вещества) и УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



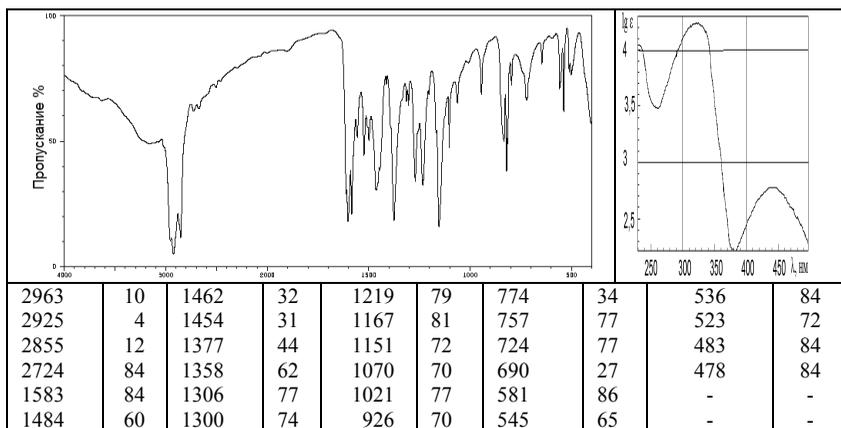
5.2.22. Определите строение органического соединения по ИК спектру (таблетка KBr) вещества и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



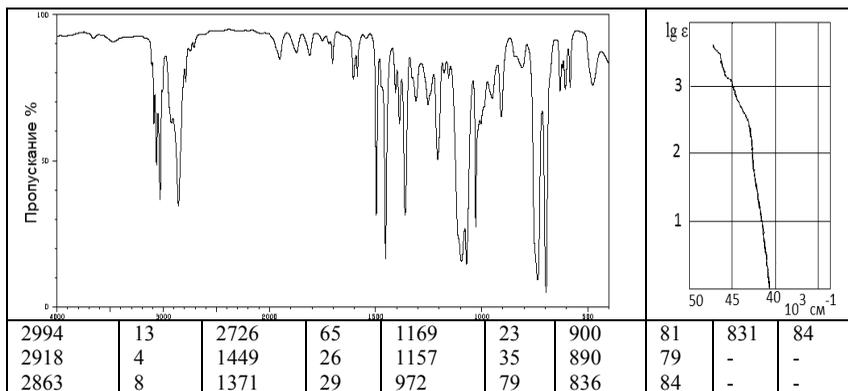
5.2.24. Определите строение органического соединения по КР спектру, снятому для жидкой плёнки вещества, и его УФ спектру (раствор в этиловом спирте).



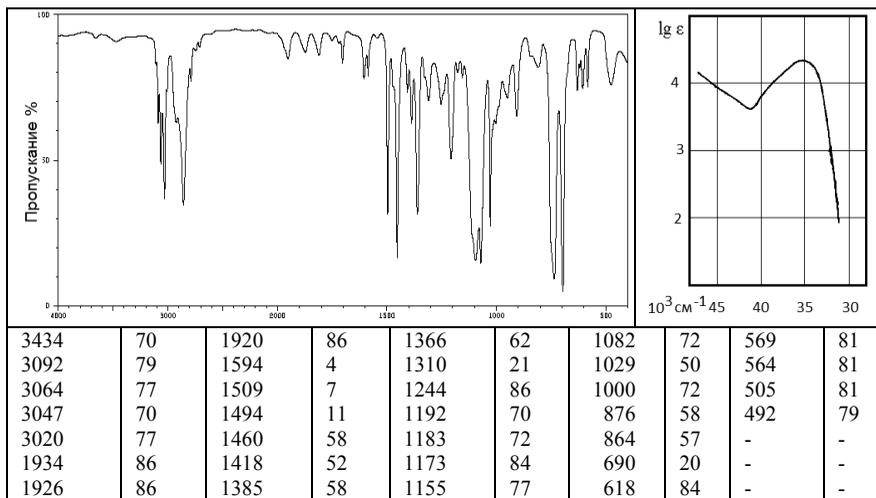
5.2.25. Определите строение органического соединения по ИК спектру (суспензия в вазелиновом масле) и его УФ (раствор в этиловом спирте).



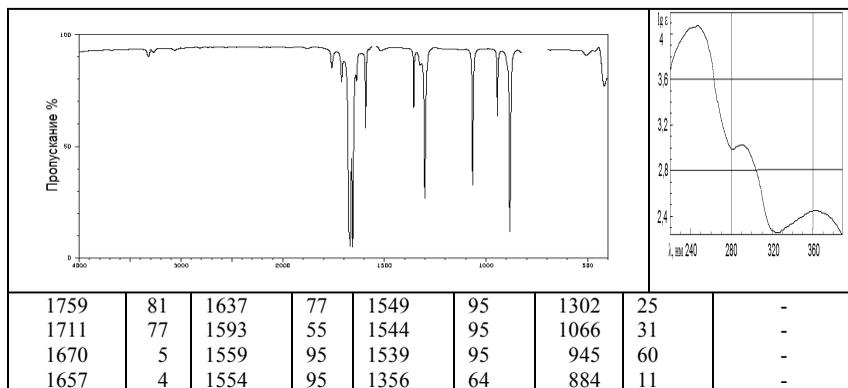
5.2.26. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в *n*-гексане).



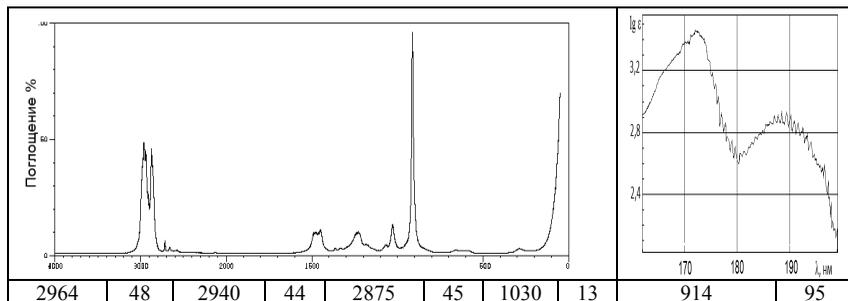
5.2.27. Определите строение органического соединения по КР спектру (порошок) вещества и его УФ спектру (раствор в *n*-гексане).



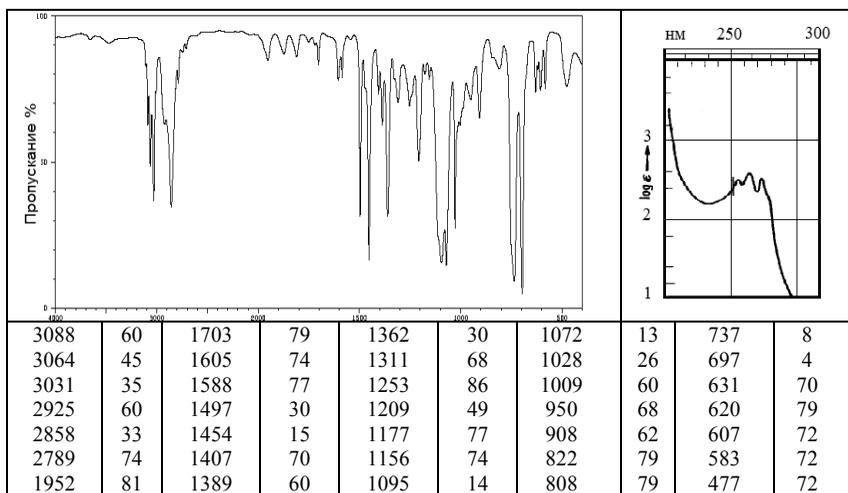
5.2.28. Определите строение органического соединения по ИК спектру (раствор  $CCl_4$ ) вещества и его УФ спектру (раствор в *n*-гексане).



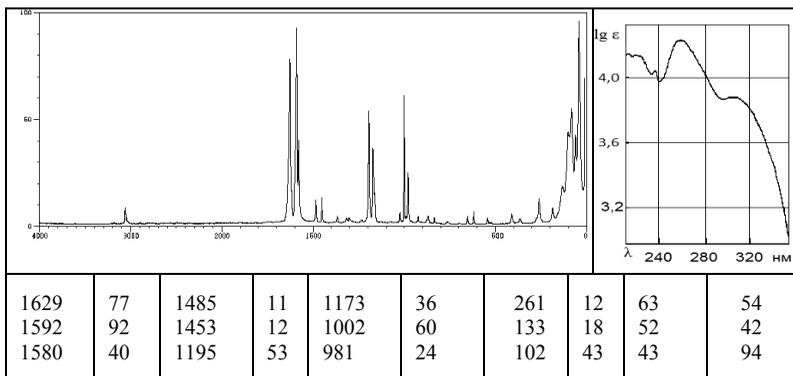
5.2.29. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (газовая фаза).



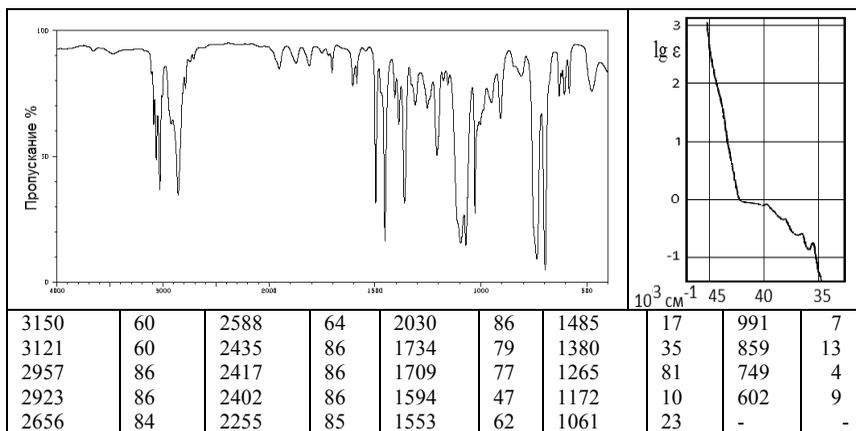
5.2.30. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектра (раствор в циклогексане).



5.2.31. Определите строение органического соединения по КР спектру (порошок) вещества и его УФ спектру (раствор в циклогексане).



5.2.32. Определите строение органического соединения по ИК спектру (жидкая плёнка) вещества и его УФ спектру (раствор в *n*-гексане).



## Литература

1. *Гордон А., Форд Р.* Спутник химика: Физико-химические свойства, методики, библиография. М.: Мир, 1976. 543 с.
2. *Смит А.* Прикладная ИК-спектроскопия: Основы, техника, аналитическое применение. М.: Мир, 1982. 328 с.
3. *Казичина Л.А., Кулетская Н.Б.* Применение УФ-, ИК- и ЯМР спектроскопии в органической химии. М.: Изд-во МГУ, 1979. 222 с.
4. URL: [webbook.nist.gov](http://webbook.nist.gov)
5. *Пентин Ю.А.* Основы молекулярной спектроскопии. М.: Бином, 2008. 398 с.
6. *Сильверстейн Р., Вебстер Ф., Кимл Д.* Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: БИНОМ, Лаб. Знаний, 2012. 557 с.
7. *Рыжова Г.Л., Дозморов С.В.* колебательные спектры нитро-соединений и комплексов на их основе: учебно-методическое пособие. Томск: Изд-во Том. ун-та, 1979. 176 с.
8. Морозова Ю.П., Прялкин Б.С. Букварь по электронной спектроскопии: учебно-методическое пособие. Томск: ТГУ, 1998. 39 с.
9. *Браун Д., Флloyd А., Сейнзбери М.* Спектроскопия органических соединений. М.: Мир, 1992. 300 с.
10. *Мейстер Т.Г.* Электронные спектры многоатомных молекул. Л.: Изд-во ЛГУ, 1969. 206 с.
11. *Преч Э., Бюльманн Ф., Аффельтер К.* Определение строения органических соединений: Таблицы спектральных данных. М.: БИНО, 2006. 438 с.
12. *Идентификация органических соединений.* /Р. Шрайнер, Р. Фьюзон, Д. Кёртин, Т. Моррилл. М.: Мир, 1983. 704 с.
13. *Сущинский М.М.* Комбинационное рассеяние света и строение вещества. М.: Наука, 1981. 182 с.
14. *Финч А. и др.* Применение длинноволновой ИК-спектроскопии в химии. М.: Мир, 1973. 284 с.
15. *Общая органическая химия* /Под ред. Д. Бартона, У.Д. Оллиса. В 12 т. М.: Химия, 1981.
16. *Исаакс Н.* Практикум по физической-органической химии. М.: Мир, 1972. 290 с.

*Издание подготовлено в авторской редакции*

Отпечатано на участке оперативной полиграфии  
Издательского Дома Томского государственного университета

Заказ № 143 от «б» февраля 2014 г. Тираж 100 экз.