

А. В. Васильев
Спектроскопия

ИНФРАКРАСНАЯ

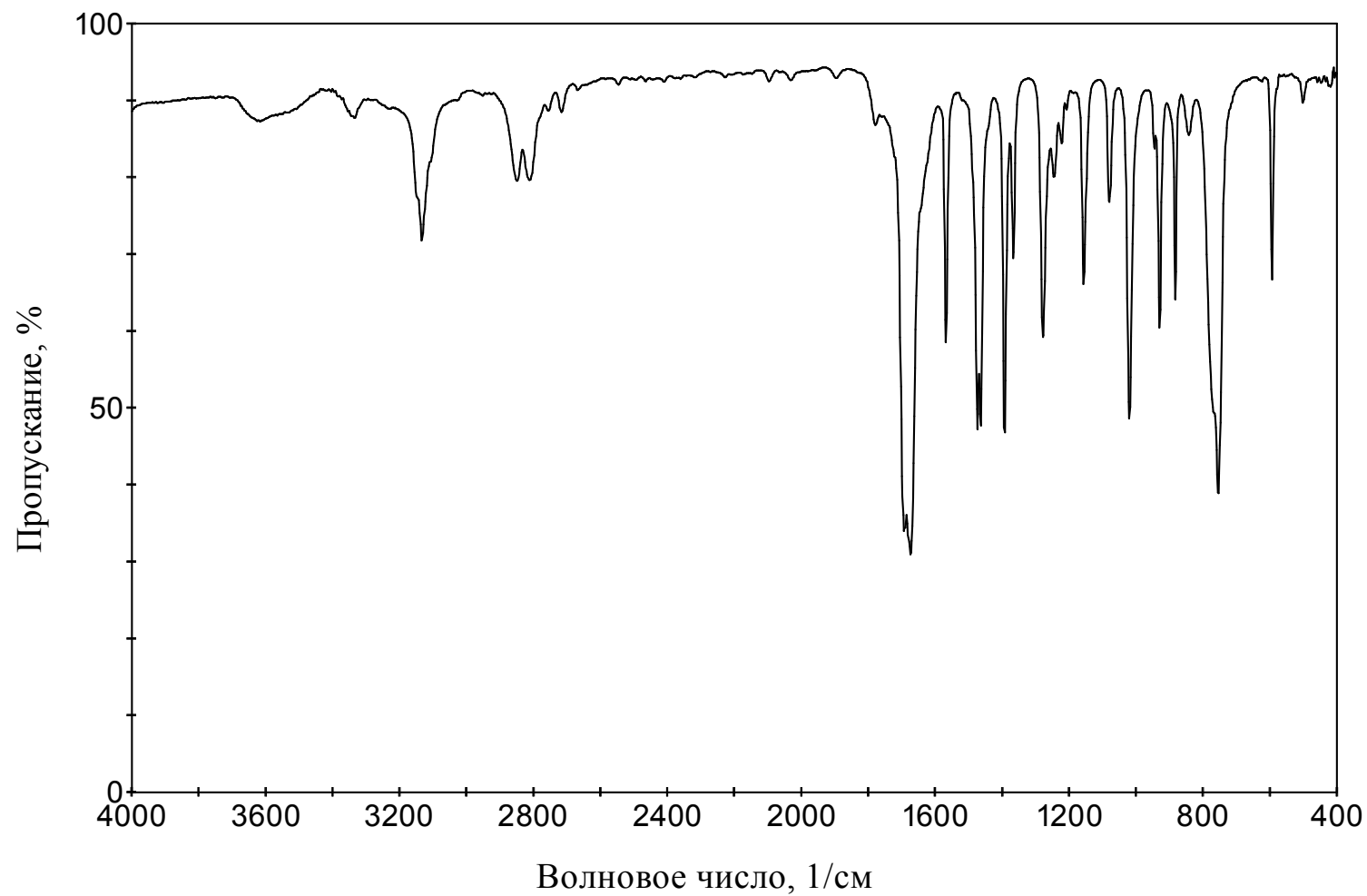
СПЕКТРОСКОПИЯ

А. В. Васильев
Спектроскопия

А. В. Васильев
Спектроскопия

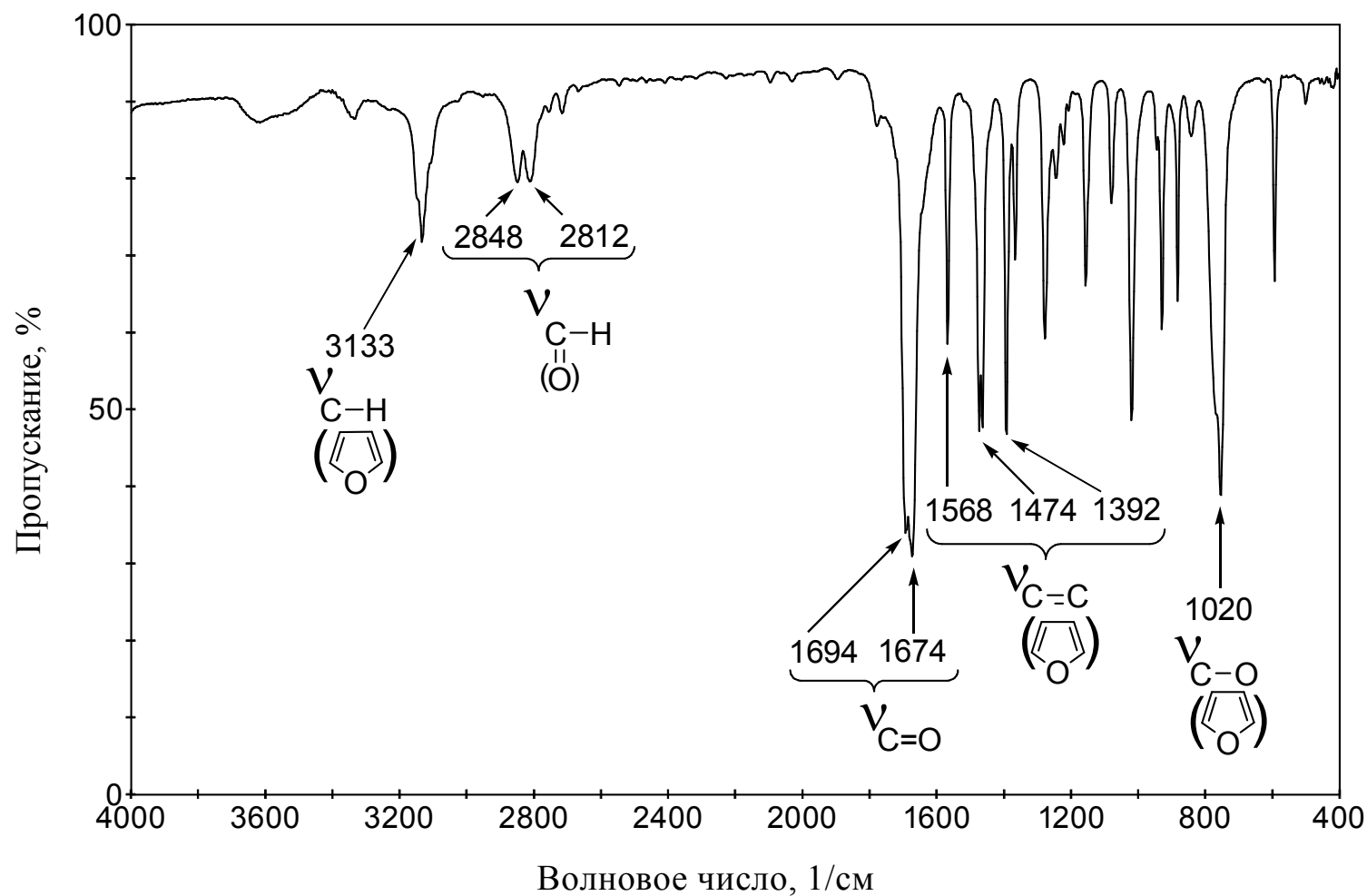
А. В. Васильев
Спектроскопия

ИК-спектр неизвестного соединения



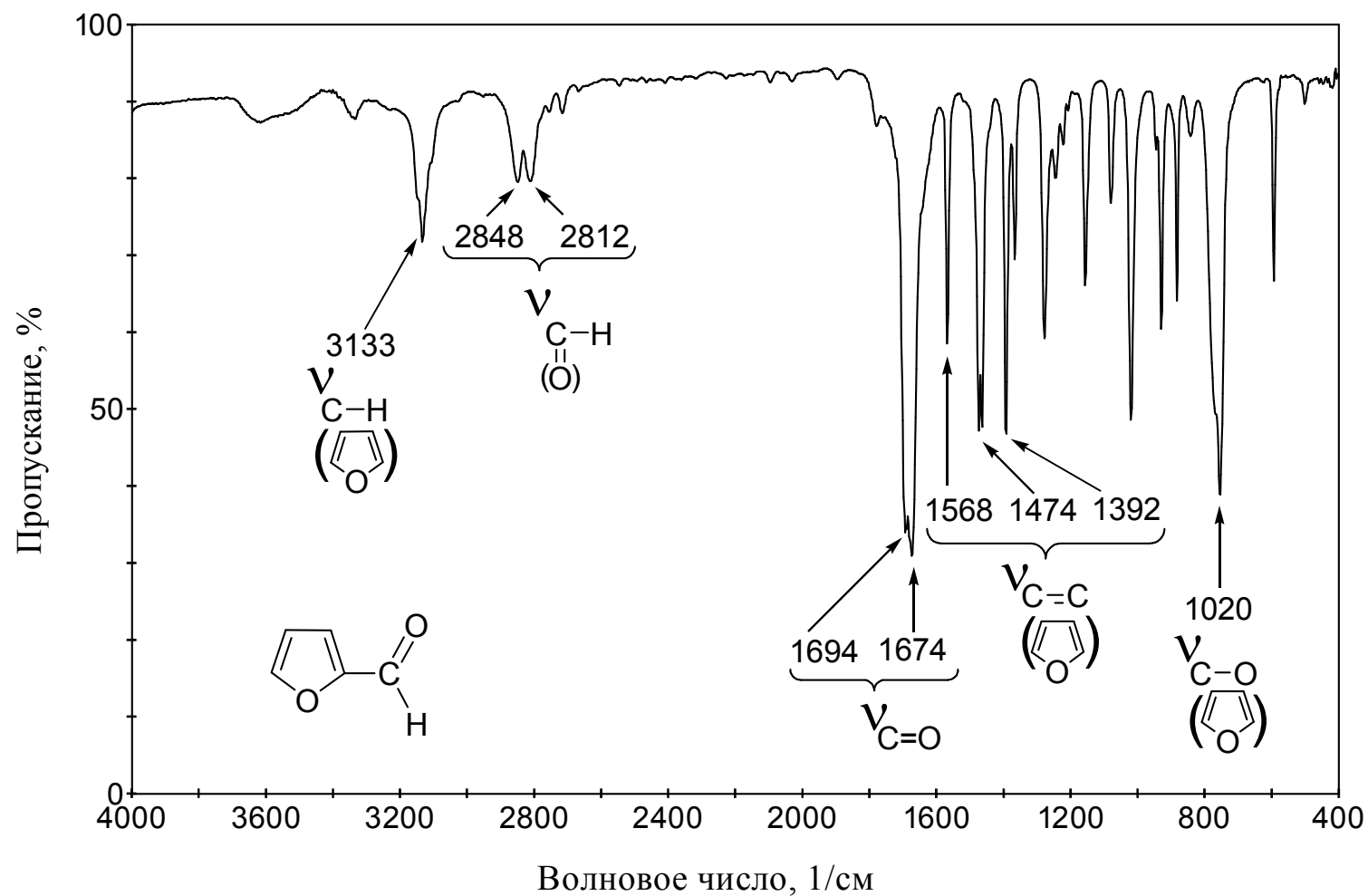
Инфракрасная спектроскопия

ИК-спектр неизвестного соединения с выполненным отнесением сигналов



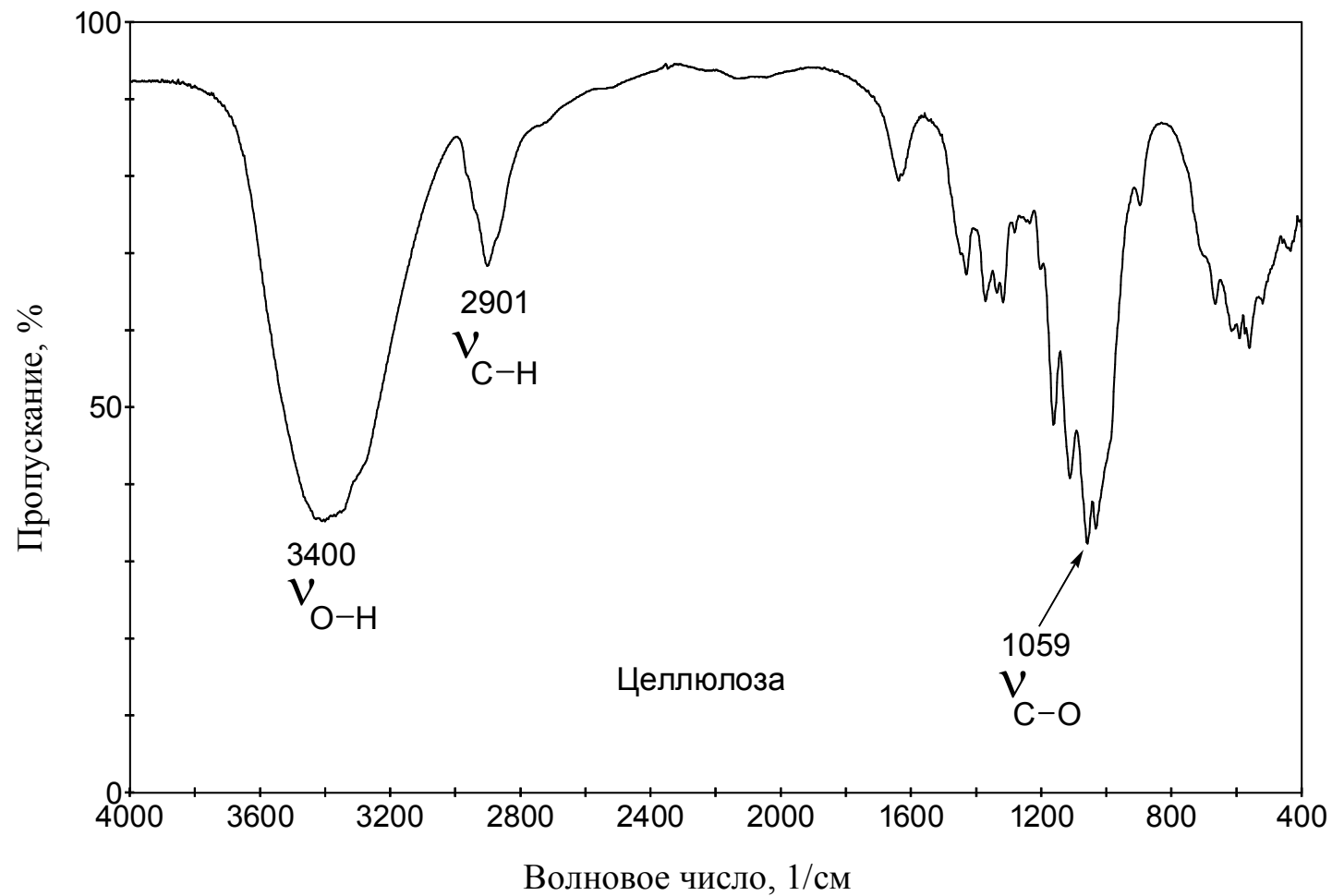
Инфракрасная спектроскопия

Неизвестное соединение - фурфурол



Инфракрасная спектроскопия

ИК-спектр целлюлозы



Инфракрасная спектроскопия

Характеристика ИК-излучения

Инфракрасным излучением называют излучение с длинами волн от 0.5 до 1000 мкм.

В ИК-диапазоне проявляются переходы между колебательными и вращательными уровнями энергии молекул.

Большинство колебательных переходов в молекулах органических соединений реализуется в диапазоне длин волн λ от 2.5 до 25 мкм. В единицах волновых чисел $\nu = 1/\lambda$ – 4000-400 см⁻¹.

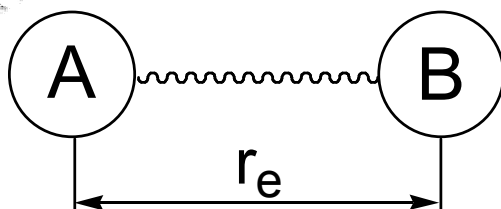
Инфракрасная спектроскопия

Задачи, решаемые с помощью ИК-спектроскопии

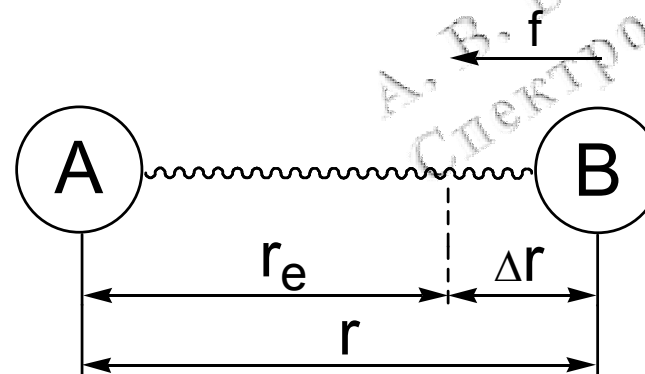
1. Качественный анализ. Определение функциональных групп органических соединений: C=O, OH, NH₂ и др.
2. Количественный анализ смесей органических соединений.
3. Исследование межмолекулярных взаимодействий: водородные связи, донорно-акцепторные взаимодействия и др.

Инфракрасная спектроскопия

Колебания двухатомной молекулы АВ



а



б

а) система **AB** в состоянии равновесия

б) смещение атомов **A** и **B** на расстояние Δr
и появление при этом возвращающей силы **f**

$$\mathbf{f} = -k\Delta r$$

f – возвращающая сила

$\Delta r = r - r_e$ – изменение длины связи

k – силовая постоянная связи

Инфракрасная спектроскопия

Гармонический осциллятор

Потенциальная энергия $V_{\text{гарм.}}$
системы гармонического осциллятора:

$$V_{\text{гарм.}} = \frac{1}{2} k \Delta r^2$$

k – силовая постоянная химической связи

Δr – смещение атомов из положения равновесия

Функция $V(r)$ – симметричная парабола, проходящую через точку минимума, соответствующую равновесному межъядерному расстоянию r_e .

Колебательная энергия гармонического осциллятора

$$E_{\text{кол.}}^{\text{гарм.}} = h\nu_0 \left(\nu + \frac{1}{2} \right)$$

h – постоянная Планка

$\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$ (и т.д. целые числа) –
колебательное квантовое число

ν_0 – частота колебаний гармонического осциллятора

Инфракрасная спектроскопия

Частота колебаний гармонического осциллятора

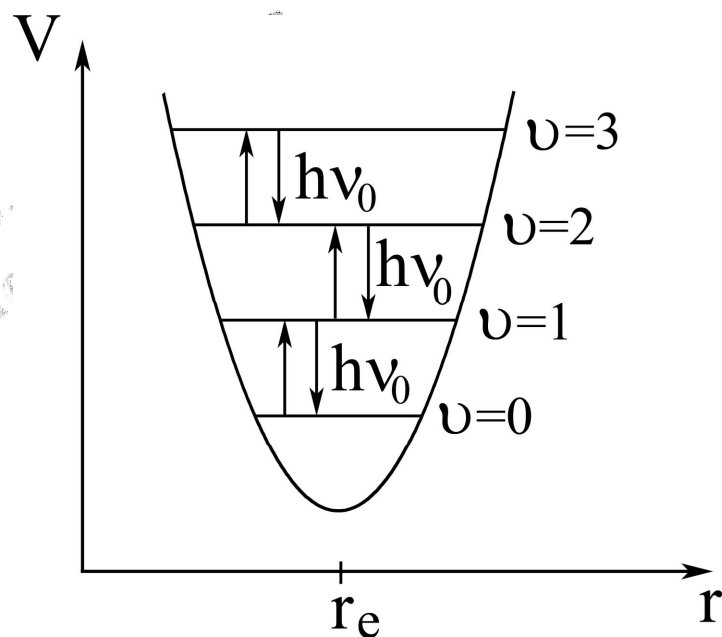
$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{M}}$$

k – силовая постоянная связи

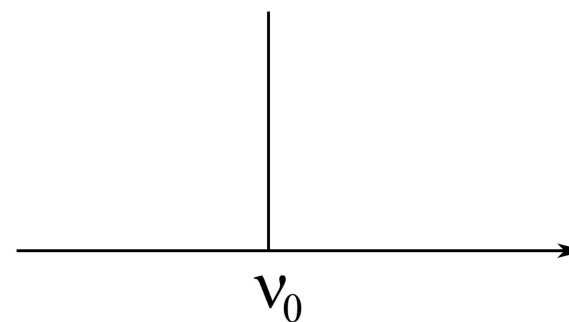
M = $m_A m_B / m_A + m_B$ – приведенная масса двухатомной системы **AB**,

m_A – масса атома **A**, **m_B** – масса атома **B**

Инфракрасная спектроскопия



а



б

а) кривая потенциальной энергии и уровни колебательной энергии гармонического осциллятора

б) схематический колебательный спектр гармонического осциллятора

Инфракрасная спектроскопия

Правило отбора колебаний гармонического осциллятора

Гармонический осциллятор характеризуется набором равноотстоящих энергетических уровней, отличающихся друг от друга на одинаковую величину $h\nu_0$.

Правило отбора для перехода между колебательными уровнями имеет вид:

$$\Delta \nu = \pm 1$$

Разрешенными являются только
переходы между соседними уровнями.

Например, переход между уровнями с $\nu = 0$ и $\nu = 1$ разрешен ($\Delta \nu = 1$), а между уровнями с $\nu = 0$ и $\nu = 2$ запрещен ($\Delta \nu = 2$).

Инфракрасная спектроскопия

Ангармонический осциллятор

Реальные молекулярные системы – ангармонические осцилляторы!

Потенциальная энергия ангармонического осциллятора $V_{\text{ангарм.}}$ описывается функцией Морзе:

$$V_{\text{ангарм.}} = D(1 - e^{-a\Delta r})^2$$

D – энергия диссоциации связи

Δr – смещение атомов из положения равновесия

a – постоянная

Инфракрасная спектроскопия

Постоянная **a** определяется соотношением:

$$a = 2\pi\nu_0\sqrt{\frac{M}{2D}}$$

ν_0 – частота осциллятора

M – приведенная масса двухатомной системы **AB**

D – энергия диссоциации связи

Инфракрасная спектроскопия

Колебательная энергия ангармонического осциллятора

Колебательная энергия ангармонического осциллятора $E_{\text{кол.}}^{\text{ангарм.}}$ квантуется согласно закону:

$$E_{\text{кол.}}^{\text{ангарм.}} = h\nu_0 \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - \frac{h^2 \nu_0^2}{4D} \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2$$

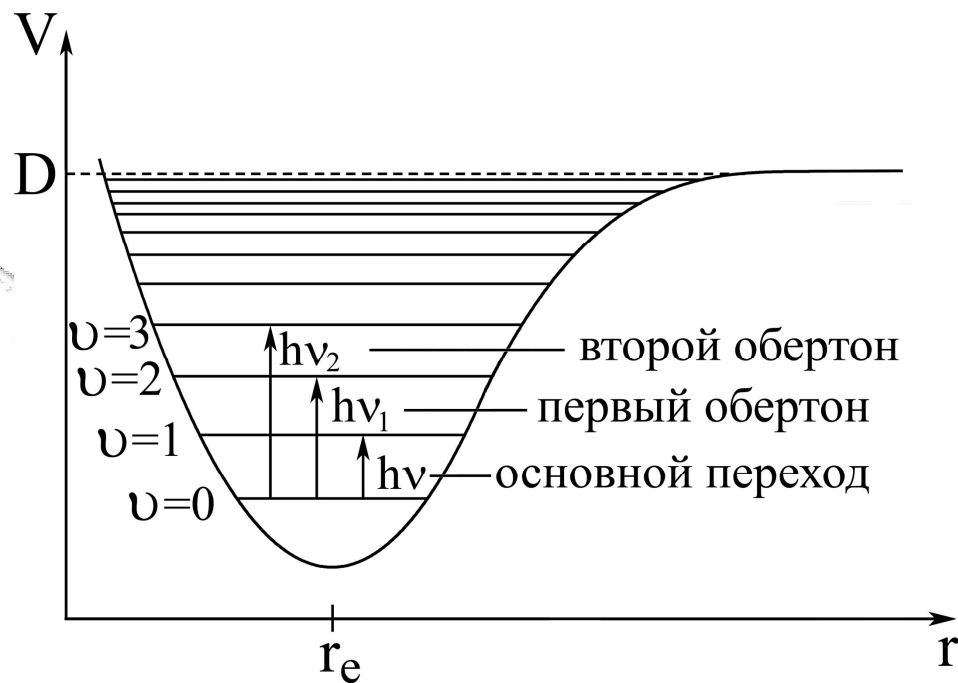
h – постоянная Планка

$\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$ (и т.д. целые числа) –
колебательное квантовое число

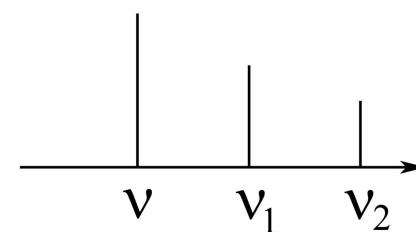
ν_0 – частота осциллятора

D – энергия диссоциации связи

Инфракрасная спектроскопия



а



б

а) кривая потенциальной энергии и уровни колебательной энергии ангармонического осциллятора

б) схематический колебательный спектр ангармонического осциллятора

Инфракрасная спектроскопия

А. В. Васильев
Спектроскопия

По мере увеличения квантового числа ν колебательные уровни ангармонического осциллятора будут постепенно сближаться, в конечном итоге, перейдя в континуум энергии при $E_{\text{кол. ангарм.}} = D$.

ИК-спектр ангармонического осциллятора представляет собой набор нескольких линий.

Инфракрасная спектроскопия

В случае ангармонического осциллятора
(реальной молекулярной системы)

могут реализовываться переходы не только между соседними
колебательными уровнями с $\Delta v = 1$, но и переходы с $\Delta v = 2, 3, \dots$

Переход между уровнями с $v = 0$ и $v = 1$ ($\Delta v = 1$) – основная частота $h\nu$.

Переход между уровнями с $v = 0$ и $v = 2$ ($\Delta v = 2$) – первый обертона $h\nu_1$.

Переход между уровнями с $v = 0$ и $v = 3$ ($\Delta v = 3$) – второй обертона $h\nu_2$.

Частота первого обертона $\nu_1 < 2\nu$.

Частота второго обертона $\nu_2 < 3\nu$.

Инфракрасная спектроскопия

Колебания многоатомных молекул

Степени свободы – это число независимых параметров для описания положения всех атомов молекулы в декартовых координатах (x, y, z).

Молекула, состоящая из N атомов, имеет $3N$ степеней свободы.

Инфракрасная спектроскопия

Нелинейные молекулы

Три степени свободы – поступательное движение молекулы как целого.

Три степени свободы – вращательное движение молекулы вокруг ее главных осей.

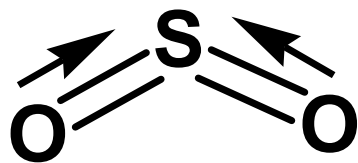
Оставшиеся $3N-6$ степеней свободы представляют собой **нормальные колебания – независимые, повторяющиеся сами по себе движения молекулы.**

Полное колебательное движение молекулы можно представить в виде комбинации нормальных колебаний.

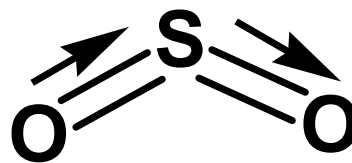
Инфракрасная спектроскопия

Колебания нелинейной молекулы SO₂

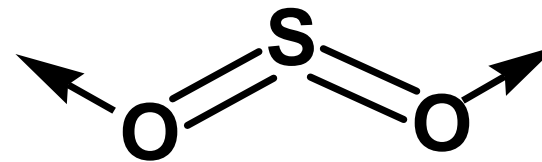
$$3 \times N - 6 = 3 \times 3 - 6 = 3 \text{ (три нормальных колебания)}$$



обе связи
синхронно
растягиваются
и сокращаются



одна связь
растягивается,
другая
сокращается



колебание
с изменением
угла между
связями

Линейные молекулы

Три степени свободы – поступательное движение молекулы как целого.

Две степени свободы – вращательное движение молекулы вокруг ее главных осей.

3N-5 степеней свободы – нормальные колебания.

Колебания линейной молекулы CO₂

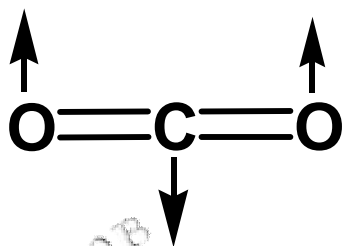
$$3 \times N - 5 = 3 \times 3 - 5 = 4 \text{ (четыре нормальных колебания)}$$



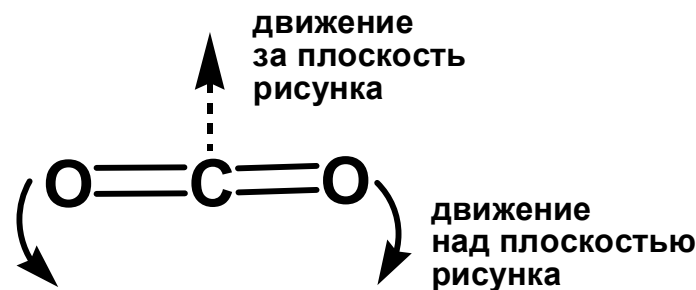
обе связи
синхронно
растягиваются
и сокращаются



одна связь
растягивается,
другая
сокращается



колебание
с изменением
угла между
связями



колебание
с изменением
угла между
связями

В ИК-спектрах проявляются только колебания тех связей для которых характерно изменение электрического дипольного момента μ связи.

Основное колебание активно в ИК-спектре, если первая производная дипольного момента μ по нормальной координате r отлична от 0, т. е.:

$$d\mu/dr \neq 0$$

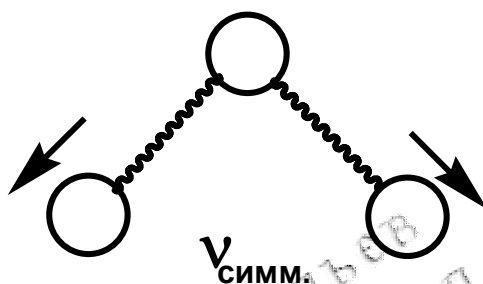
**В ИК-спектрах органических соединений
проявляются с высокой интенсивностью
колебания полярных связей
C–O, C=O, C–N, N=O, S=O и т.п.**

Инфракрасная спектроскопия

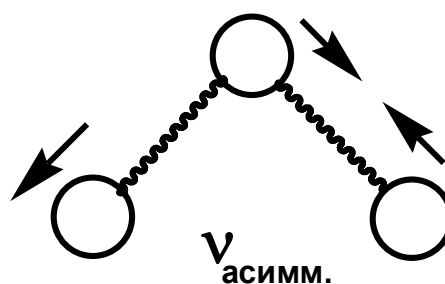
Типы колебаний

1. Валентные колебания ν сопровождаются изменением длины связи вдоль ее оси, при этом различают валентные симметричные и асимметричные колебания.

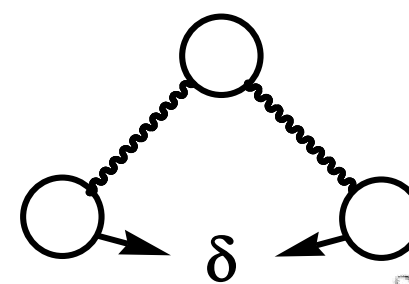
2. Деформационные колебания δ сопровождаются изменением угла между связями.



валентное симметричное колебание



валентное асимметричное колебание



деформационное колебание

Теоретический расчёт частот валентных колебаний

$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu_{AB}}} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{M_{AB}/N_{AB}}} = \frac{\sqrt{N_{AB}}}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{M_{AB}}} =$$

$$= \frac{\sqrt{6.02 \times 10^{23}}}{2 \times 3.14 \times 3 \times 10^{10}} \sqrt{\frac{k}{M_{AB}}} \approx 4.1 \sqrt{\frac{k}{M_{AB}}}$$

$$\nu \approx 4.1 \sqrt{\frac{k}{M_{AB}}} \left[\text{см}^{-1} \right]$$

Инфракрасная спектроскопия

ν – волновое число, см^{-1}

c – скорость света, $3 \times 10^{10} \text{ см/с}$

k – силовая постоянная связи, дин/см

μ_{AB} – приведённая масса двухатомной группировки АВ, г

$$\mu_{AB} = \frac{\mu_A \times \mu_B}{\mu_A + \mu_B} = \frac{\frac{M_A}{N_{AB}} \times \frac{M_B}{N_{AB}}}{\frac{M_A + M_B}{N_{AB}}} = \frac{M_A \times M_B}{N_{AB}(M_A + M_B)} = \frac{M_{AB}}{N_{AB}}$$

M_A и M_B – массы атомов, г/моль

M_{AB} – приведённая масса, г/моль

N_{AB} – число Авогадро, 6.02×10^{23}

Инфракрасная спектроскопия

Значения силовой постоянной k

1. Одинарные связи $X-Y$:

$$k = (4 \div 7) \times 10^5 \text{ дин/см}$$

2. Двойные связи $X=Y$:

$$k = (8 \div 12) \times 10^5 \text{ дин/см}$$

3. Тройные связи $X \equiv Y$:

$$k = (13 \div 18) \times 10^5 \text{ дин/см}$$

Примеры расчётов частот валентных колебаний

$$\nu_{C-H} \approx 4.1 \sqrt{\frac{k_{X-Y}}{M_C \times M_H}} = 4.1 \sqrt{\frac{5 \times 10^5}{12 \times 1}} \approx 3000 \text{ см}^{-1}$$

Экспериментальное значение $\nu_{C-H} = 3100\text{-}2800 \text{ см}^{-1}$

$$\nu_{C-C} \approx 4.1 \sqrt{\frac{5 \times 10^5}{12 \times 12}} \approx 1200 \text{ см}^{-1}$$

Экспериментальное значение $\nu_{C-C} = 1250\text{-}1140 \text{ см}^{-1}$

Инфракрасная спектроскопия

$$\nu_{C=O} \approx 4.1 \sqrt{\frac{11 \times 10^5}{12 \times 16}} \approx 1650 \text{ см}^{-1}$$

Экспериментальное значение $\nu_{C=O} = 1800\text{-}1600 \text{ см}^{-1}$

$$\nu_{C \equiv C} \approx 4.1 \sqrt{\frac{15 \times 10^5}{12 \times 12}} \approx 2050 \text{ см}^{-1}$$

Экспериментальное значение $\nu_{C \equiv C} = 2300\text{-}2000 \text{ см}^{-1}$

Основные области ИК-спектров органических соединений

1. 4000-2500 см^{-1} . Область валентных колебаний простых связей X-H : O-H , N-H , C-H , S-H .

2. 2500-1500 см^{-1} . Область валентных колебаний кратных связей X=Y , $\text{X}\equiv\text{Y}$: C=C , C=O , C=N , $\text{C}\equiv\text{C}$, $\text{C}\equiv\text{N}$.

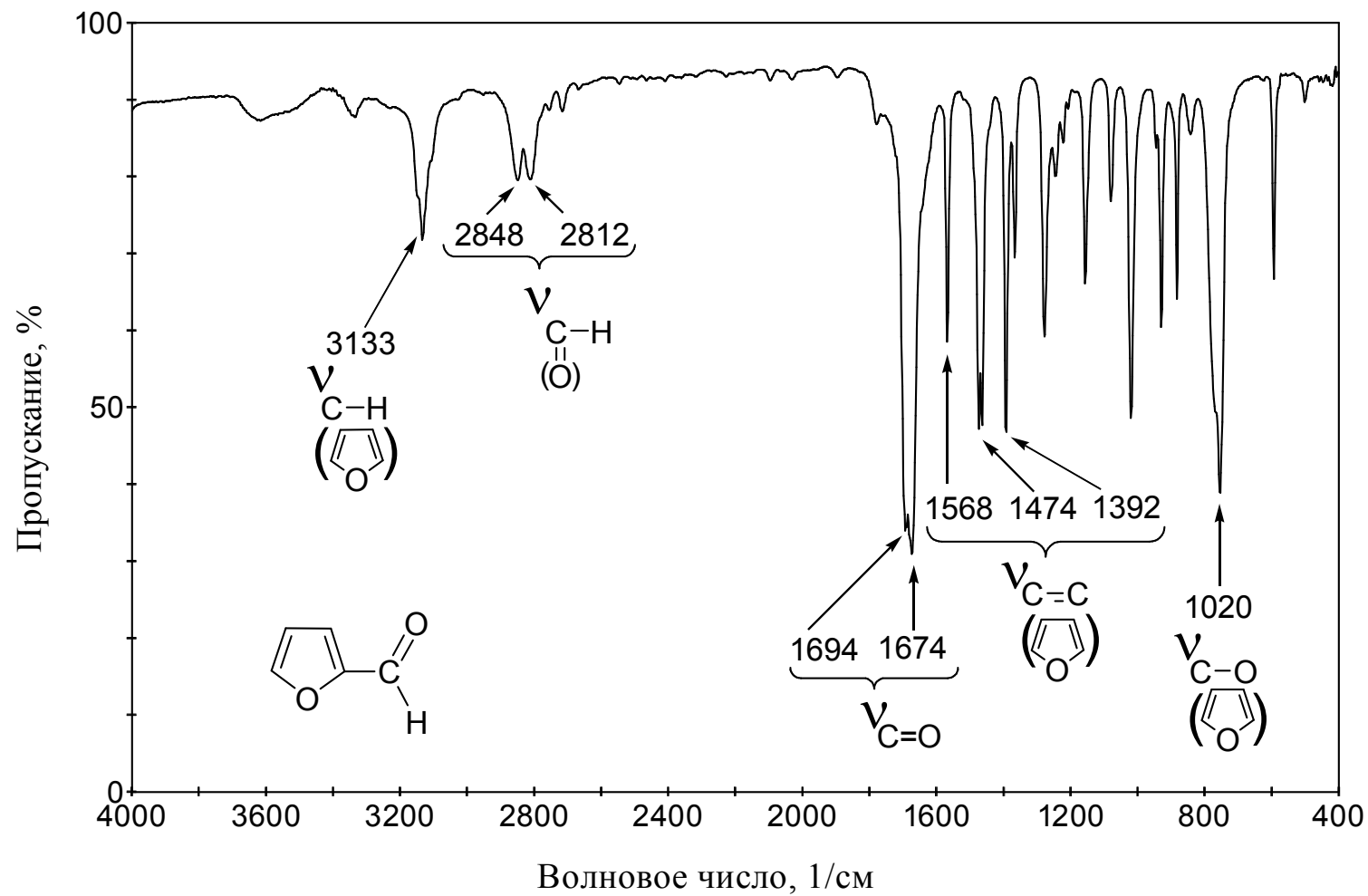
3. 1500-500 см^{-1} . Область валентных колебаний простых связей X-Y : C-C , C-N , C-O и деформационных колебаний простых связей X-H : C-H , O-H , N-H .

Эта область также называется
"областью отпечатков пальцев",

т.к. положение и интенсивность полос поглощения в этом диапазоне сугубо индивидуальны для каждого конкретного органического соединения.

Инфракрасная спектроскопия

ИК-спектр фурфурола

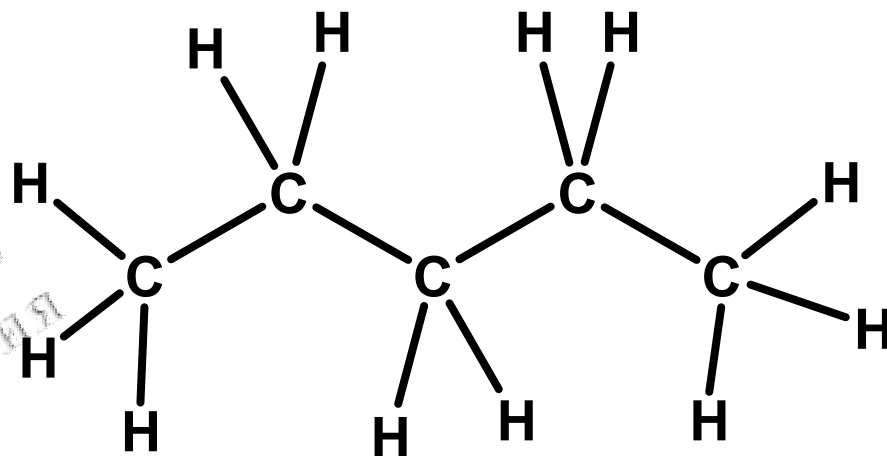


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений.

Алканы

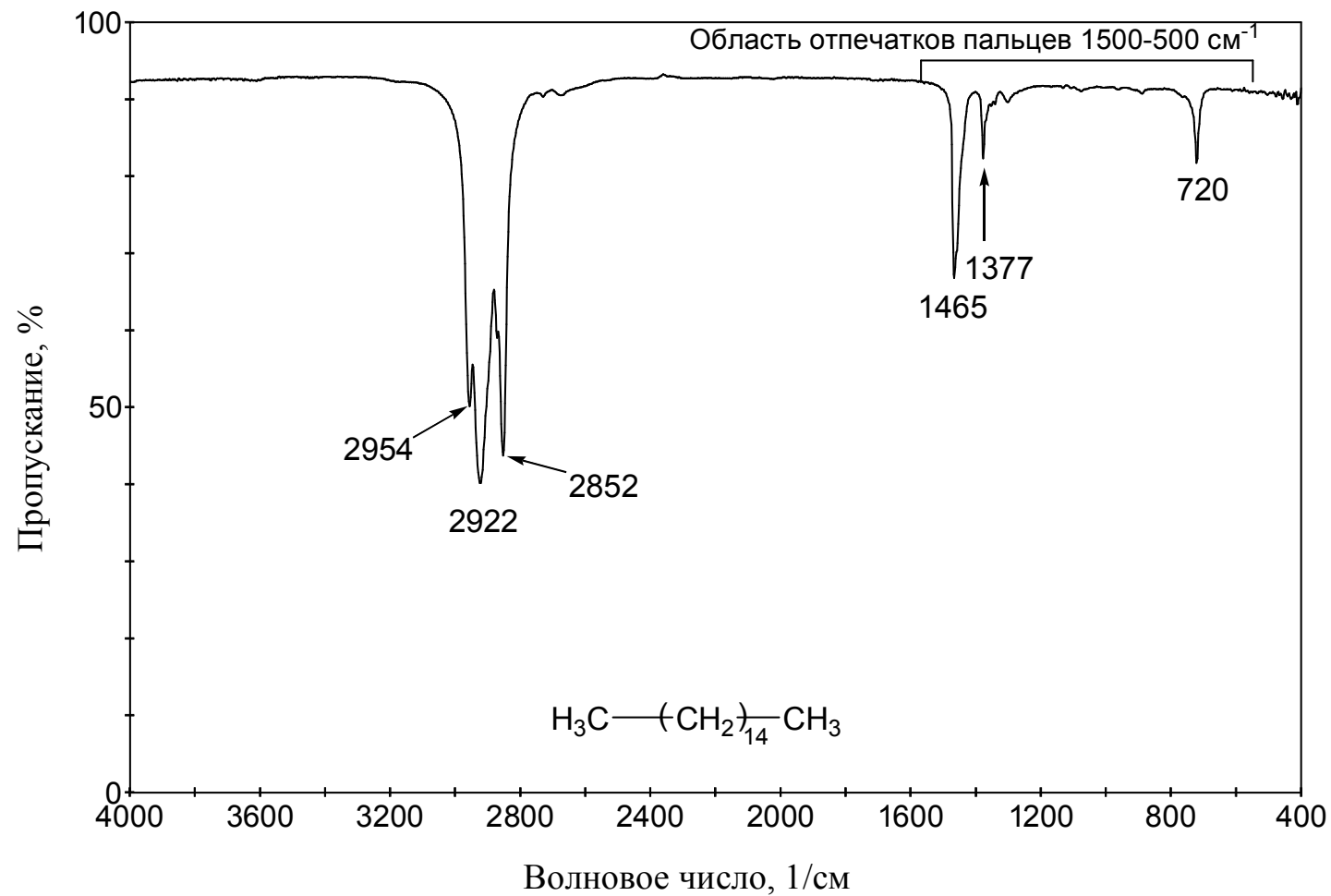
Типы связей в алканах: $C_{sp^3}-H$, $C_{sp^3}-C_{sp^3}$

Структура *n*-пентана



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

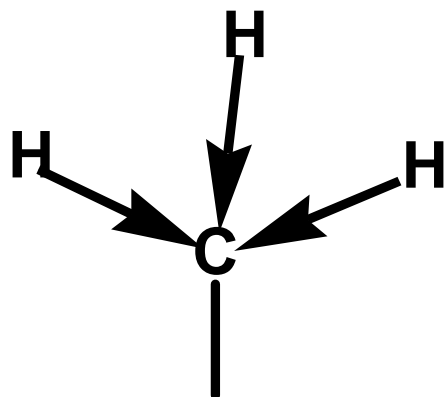
ИК-спектр *n*-гексадекана



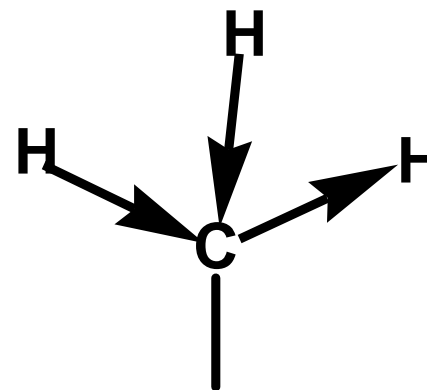
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Валентные колебания связей С–Н в алканах

Группа $-\text{CH}_3$



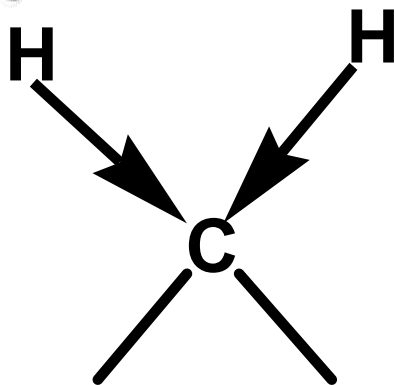
$$\nu_{\text{CH}_3, \text{ симм-}} = 2885\text{--}2860 \text{ см}^{-1}$$



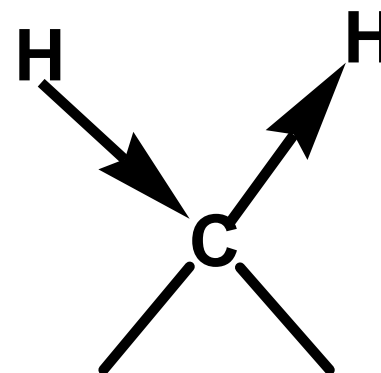
$$\nu_{\text{CH}_3, \text{ асимм-}} = 2975\text{--}2950 \text{ см}^{-1}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Группа -CH₂-



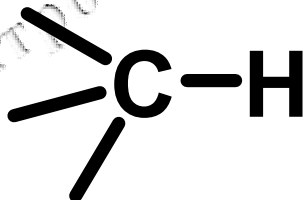
$$\nu_{\text{CH}_2, \text{ симм-}} = 2870-2845 \text{ см}^{-1}$$



$$\nu_{\text{CH}_2, \text{ асимм-}} = 2940-2915 \text{ см}^{-1}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Группа СН



$$\nu_{\text{C-H}} = 2900-2880 \text{ см}^{-1}$$

**Общий диапазон поглощения
валентных колебаний связей С-Н в алканах:**

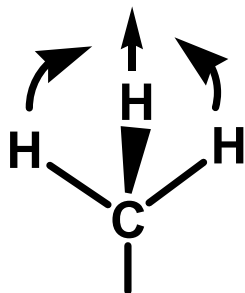
$$\nu_{\text{Csp}^3\text{-H}} = 2975-2845 \text{ см}^{-1}$$

полосы
высокой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

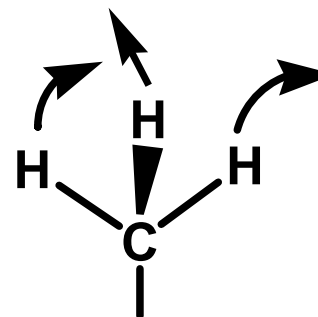
Деформационные колебания связей С–Н в алканах

Группа -CH₃



Н-атомы синхронно двигаются
"внутри" и "наружу"

$$\delta_{\text{CH}_3, \text{ симм-}} = 1395\text{-}1365 \text{ см}^{-1}$$



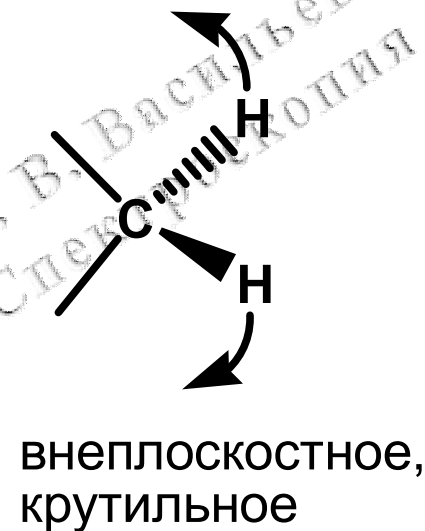
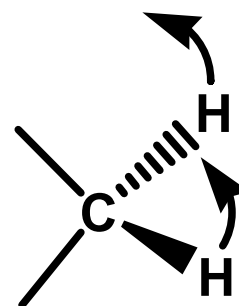
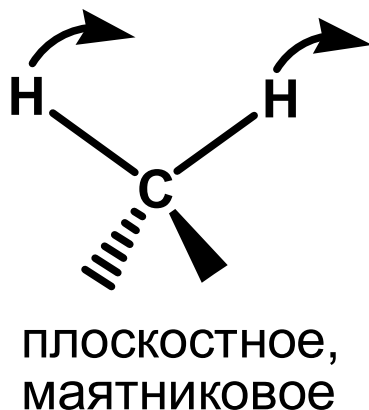
Н-атомы двигаются
асинхронно

$$\delta_{\text{CH}_3, \text{ асимм-}} = 1470\text{-}1430 \text{ см}^{-1}$$

Особенности ИК- спектроскопии органических соединений



Группа $-\text{CH}_2-$



$$\delta_{\text{CH}_2} = 1475-1450 \text{ см}^{-1}$$

внеплоскостное,
веерное

**Общий диапазон поглощения основных
деформационных колебаний связей С-Н в алканах:**

$$\delta_{\text{Csp}^3-\text{H}} = 1475-1340 \text{ см}^{-1}$$

полосы
средней
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Скелетные колебания связей С–С в алканах

$$\nu_{\text{Csp}^3-\text{Csp}^3} = 1250-1140 \text{ см}^{-1}$$

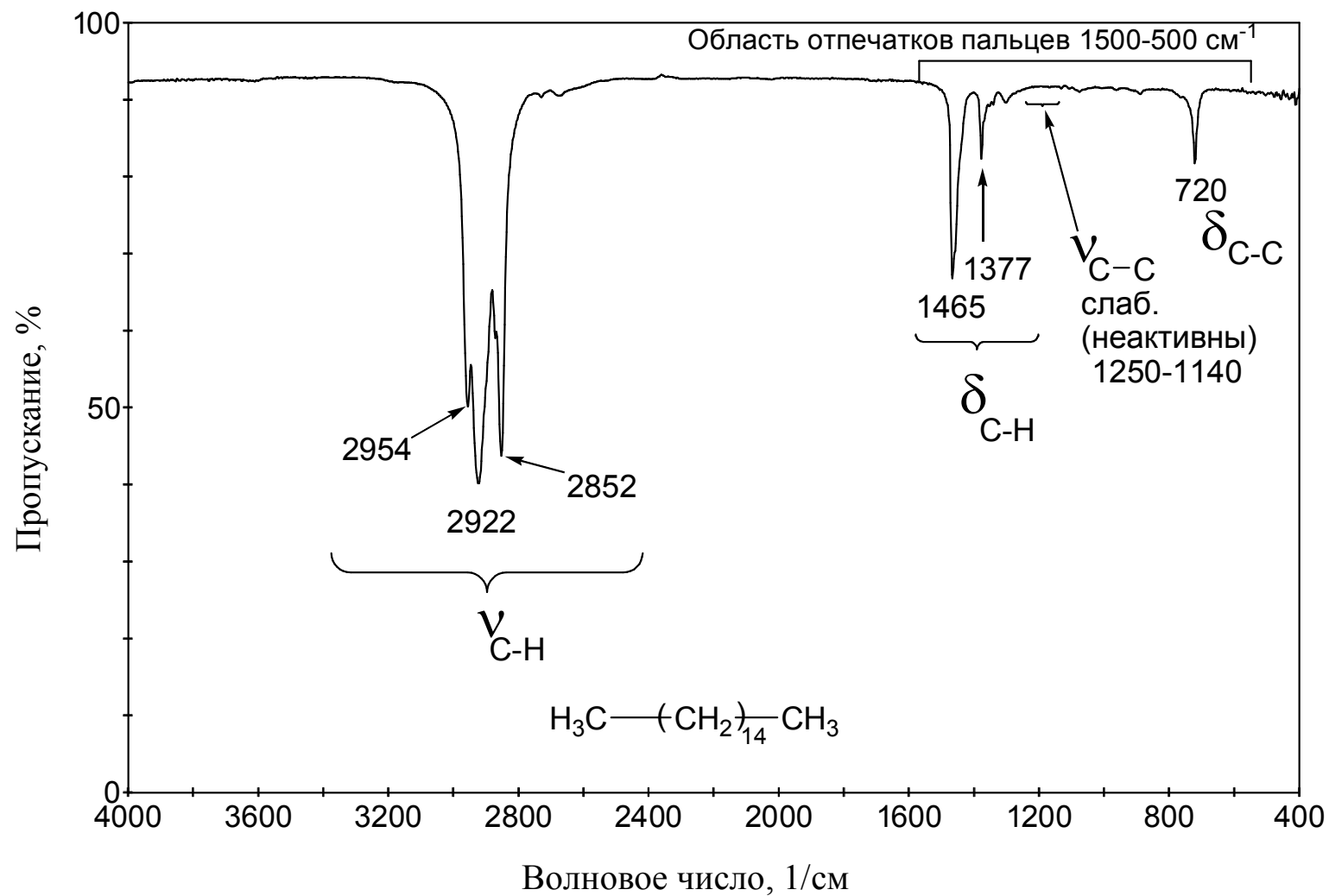
полосы
слабой
интенсивности

$$\delta_{\text{Csp}^3-\text{Csp}^3} = 810-720 \text{ см}^{-1}$$

полосы
средней
интенсивности

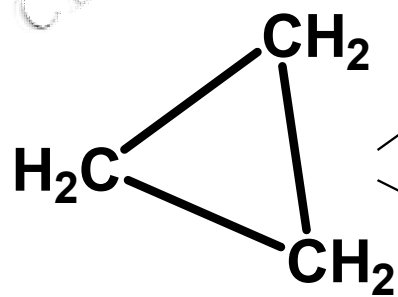
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр *n*-гексадекана



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Циклоалканы



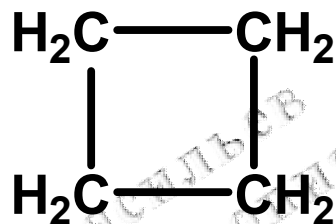
циклопропан

$$\nu_{\text{Csp}^3-\text{H}} = 3100-3050 \text{ cm}^{-1}$$
$$3035-2995 \text{ cm}^{-1}$$

полосы
высокой
интенсивности

$$\nu_{\text{Csp}^3-\text{Csp}^3} = 1020-1000 \text{ cm}^{-1}$$

полосы
средней
интенсивности



циклобутан

$$\nu_{\text{Csp}^3-\text{Csp}^3} = 1000-866 \text{ cm}^{-1}$$

полосы
средней
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Галогеналканы

$$\nu_{\text{Csp}^3\text{-F}} = 1400\text{-}1000 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_{\text{Csp}^3\text{-Cl}} = 800\text{-}600 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_{\text{Csp}^3\text{-Br}} = 600\text{-}500 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_{\text{Csp}^3\text{-I}} < 500 \text{ см}^{-1}$$

Полосы высокой интенсивности, но обычно малоинформативны.

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Алкены

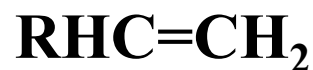
Полоса валентного колебания изолированной двойной связи C=C алкенов:

$$\nu_{\text{C}=\text{C}} = 1680\text{-}1620 \text{ см}^{-1}$$

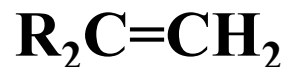
интенсивность полосы зависит от заместителей и изменяется в широких пределах

Алкен

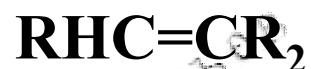
$\nu_{\text{C}=\text{C}}$, см^{-1}



1640



1650



1670



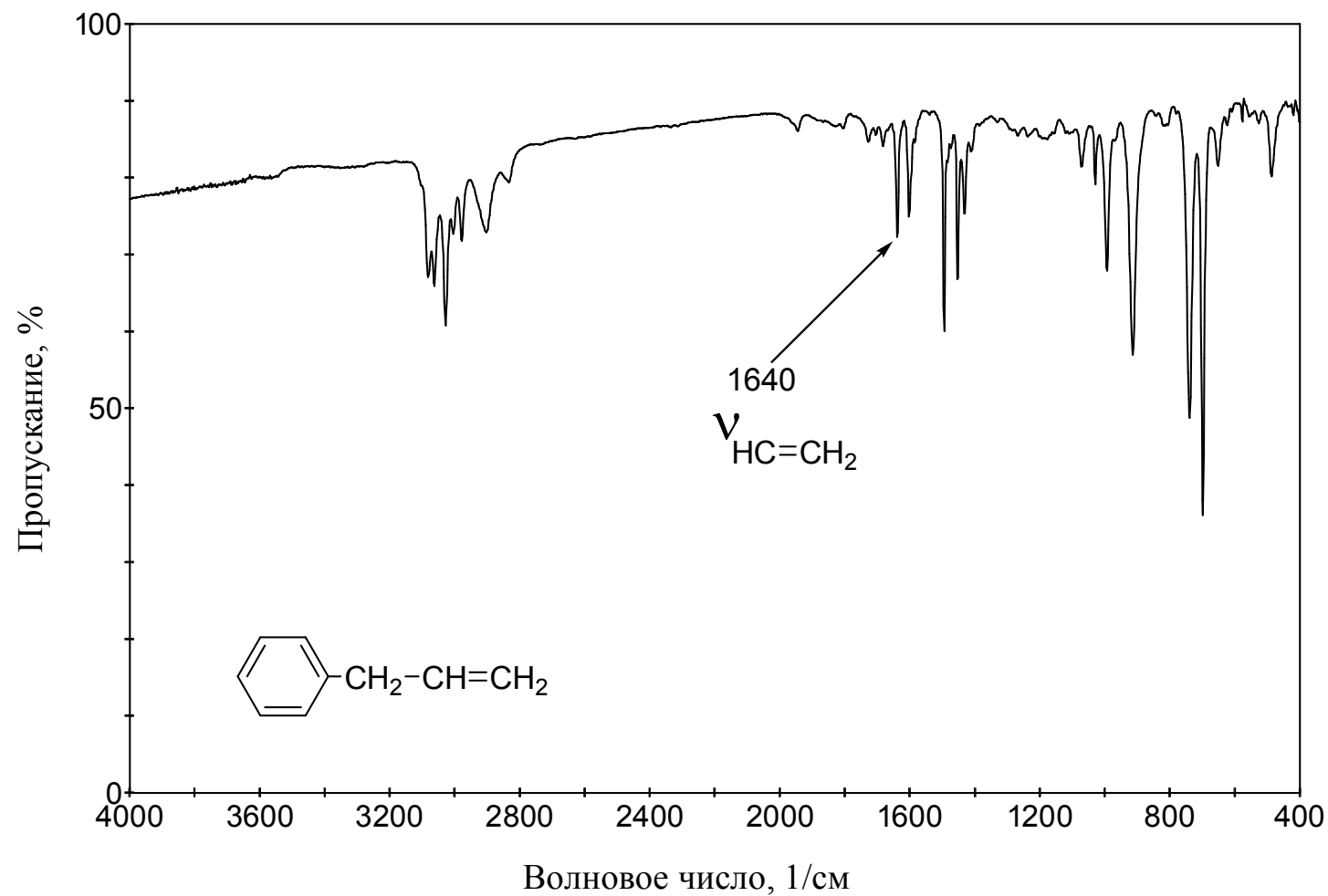
1675



1660

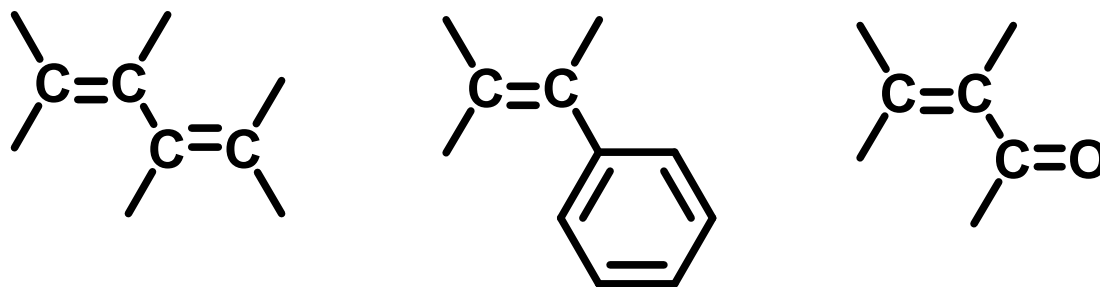
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр аллилбензола



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Сопряжение связи C=C с другой связью C=C, ароматическим ядром, карбонильной группой и др. непредельным заместителем понижает частоту колебания такой связи C=C и увеличивает интенсивность поглощения.



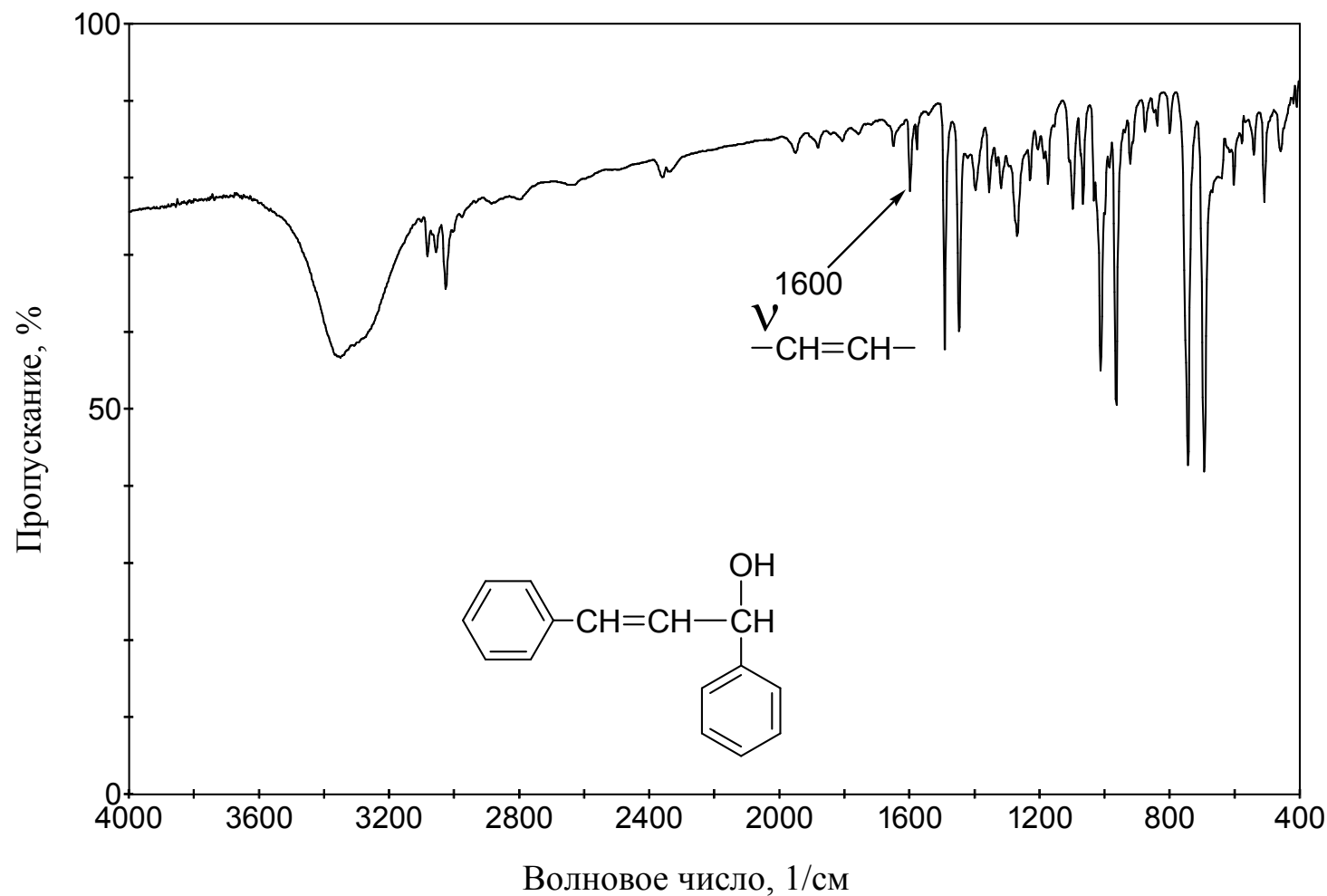
Полоса валентного колебания сопряжённой двойной связи C=C алкенов:

$$\nu_{\text{C}=\text{C}} = 1625-1600 \text{ см}^{-1}$$

полоса
высокой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр непредельного спирта



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

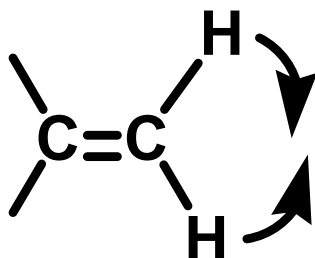
Валентные колебания связей C_{sp2}-H в алкенах

$$\nu_{\text{C-H}} = 3095-3010 \text{ см}^{-1}$$

полосы
средней
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

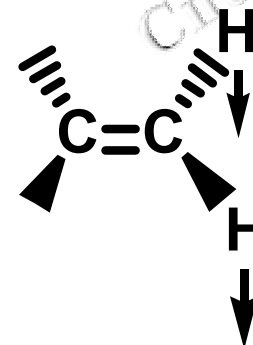
Деформационные колебания связей C_{sp2}-H в алкенах



деформационное
плоскостное

$$\delta_{\text{C-H}} = 1420-1410 \text{ см}^{-1}$$

полосы
высокой
интенсивности

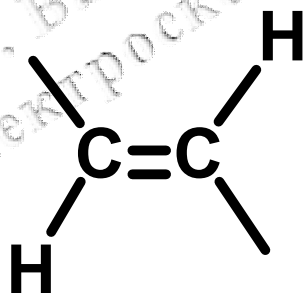


деформационное
внеплоскостное

$$\delta_{\text{C-H}} = 915-885 \text{ см}^{-1}$$

полосы
высокой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений



транс-

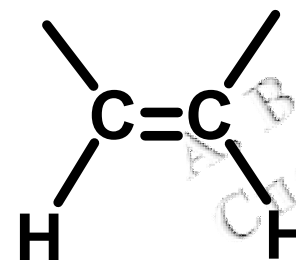
$$\delta_{\text{C-H транс-}} = 970-960 \text{ см}^{-1}$$

внеплоскостные

$$\delta_{\text{C-H транс-}} = 1310-1295 \text{ см}^{-1}$$

плоскостные

полосы
высокой
интенсивности



цис-

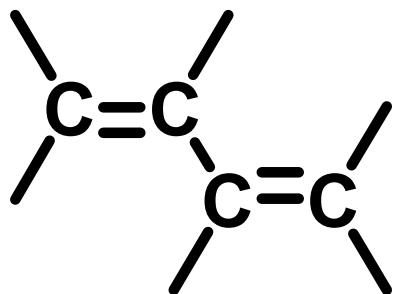
$$\delta_{\text{C-H цис-}} = 730-665 \text{ см}^{-1}$$

внеплоскостные

полосы
высокой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Сопряжённые алкадиены



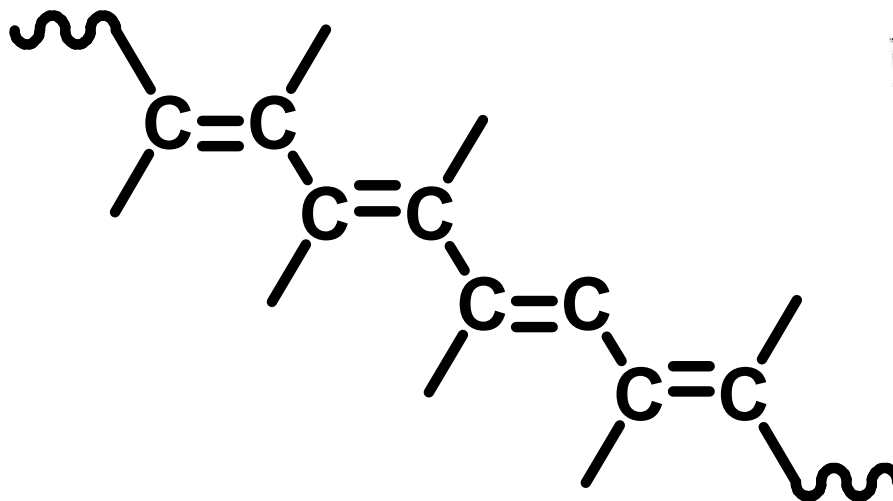
Полоса валентного колебания сопряжённой
бутадиеновой системы $C=C-C=C$:

$$\nu_{C=C-C=C} = 1645-1600 \text{ см}^{-1}$$

полоса
высокой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Сопряжённые полиены

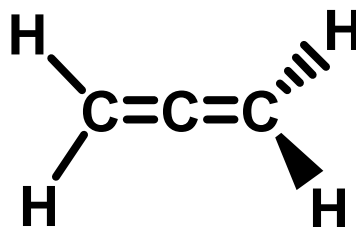


$$\nu_{\text{C}=\text{C}-(\text{C}=\text{C})_n} = 1650-1580 \text{ cm}^{-1}$$

полоса
высокой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Аллены (кумуллены)



аллен

**Полоса валентного колебания алленового фрагмента
 $\text{C}=\text{C}=\text{C}$:**

$$\nu_{\text{C}=\text{C}=\text{C}} = 1950 \text{ см}^{-1}$$
$$1060 \text{ см}^{-1}$$

полосы
высокой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Алкины (ацетилены)



терминальный
алкин



внутренний
алкин

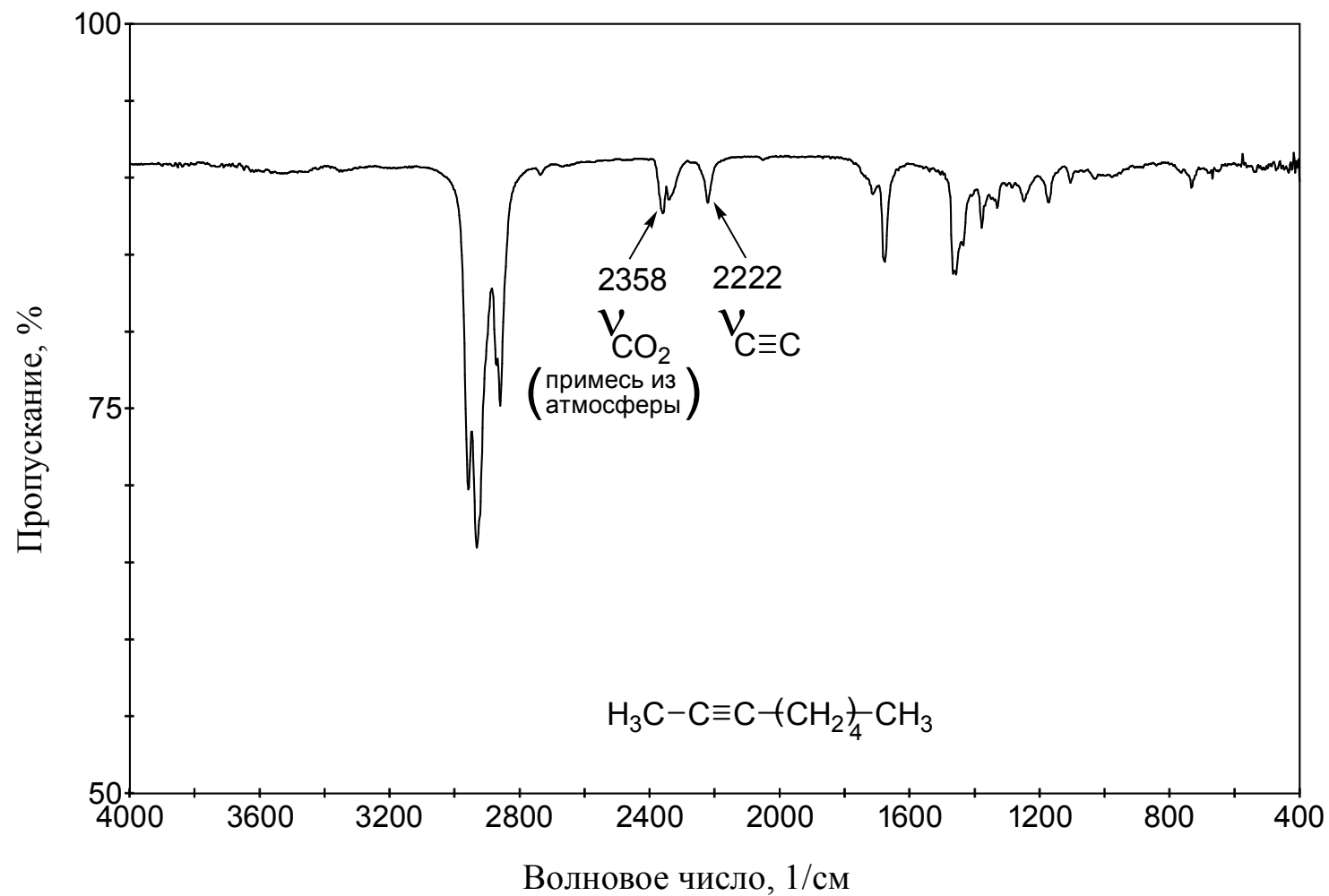
**Полоса валентного колебания
ацетиленовой связи:**

$\nu_{\text{C}\equiv\text{C}} = 2260-2190 \text{ см}^{-1}$ *полосы малой
интенсивности*
внутренний

$\nu_{\text{C}\equiv\text{C}} = 2140-2100 \text{ см}^{-1}$ *полосы от средней
до высокой
интенсивности*
терминальный

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр октина-2



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Валентные колебания связей $\equiv\text{C}_{\text{sp}}-\text{H}$
в терминальных алкинах

$$\nu_{\equiv\text{Csp-H}} = 3340-3250 \text{ см}^{-1}$$

*узкие полосы
высокой
интенсивности*

$$\begin{array}{ccccc} \nu_{\equiv\text{Csp-H}} & > & \nu_{=\text{Csp}^2-\text{H}} & > & \nu_{\text{Csp}^3-\text{H}} \\ \sim 3300 \text{ см}^{-1} & & \sim 3050 \text{ см}^{-1} & & \sim 2900 \text{ см}^{-1} \end{array}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Деформационные колебания
связей $\equiv C_{sp}-H$ в терминальных алкинах

$$\delta_{\equiv C_{sp}-H} = 680-610 \text{ см}^{-1}$$

полосы
средней
интенсивности

Обертон этой полосы проявляется при 1300-1200 см^{-1}

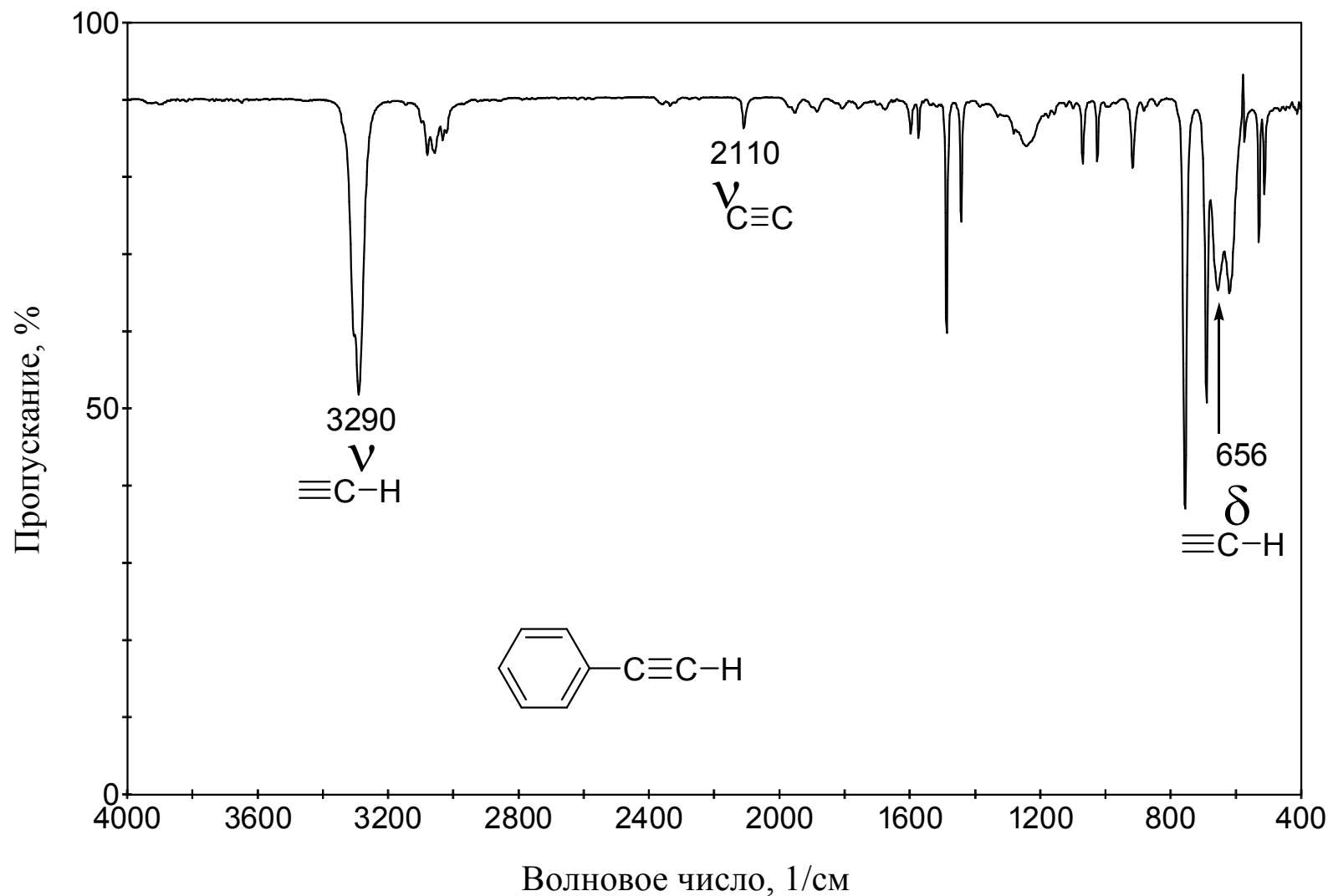
$$\nu_{1\text{-го обертонa}} < 2 \times \nu_{\text{основного тона}}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ЧУЛЬЕВ

ИК-спектр фенилацетилена

ЧУЛЬЕВ
ПЛЯ

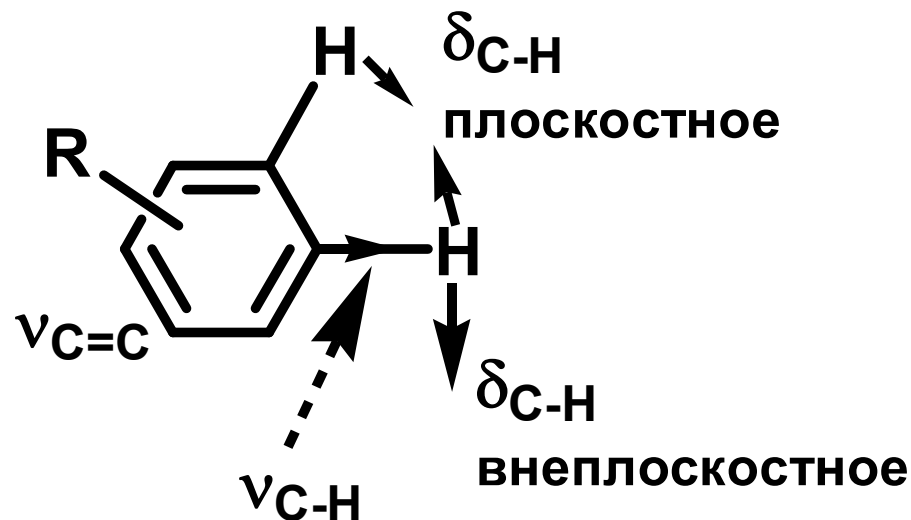


ЧУЛЬЕВ
ПЛЯ

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Степ

Производные бензола (арены)



Валентные колебания связей $C_{\text{аром.}}-H$
ароматического ядра:

$$\nu_{C_{\text{ар.}}-H} = 3100-3010 \text{ см}^{-1}$$

полосы средней
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Область составных частот и обертонов:

2000-1660 см⁻¹

полосы малой
интенсивности

*По этой области можно определить число и
положение заместителей в бензольном ядре.*

**Валентные колебания связей $\nu_{\text{аром.}} = \nu_{\text{аром.}}$
ароматического ядра:**

$\nu_{\text{Сар.}=\text{Сар.}} = 1625-1450 \text{ см}^{-1}$

полосы средней
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Деформационные колебания связей С_{аром.}-Н ароматического ядра:

$$\delta_{\text{Сар.-Н}} = 1250-950 \text{ см}^{-1}$$

плоскостные

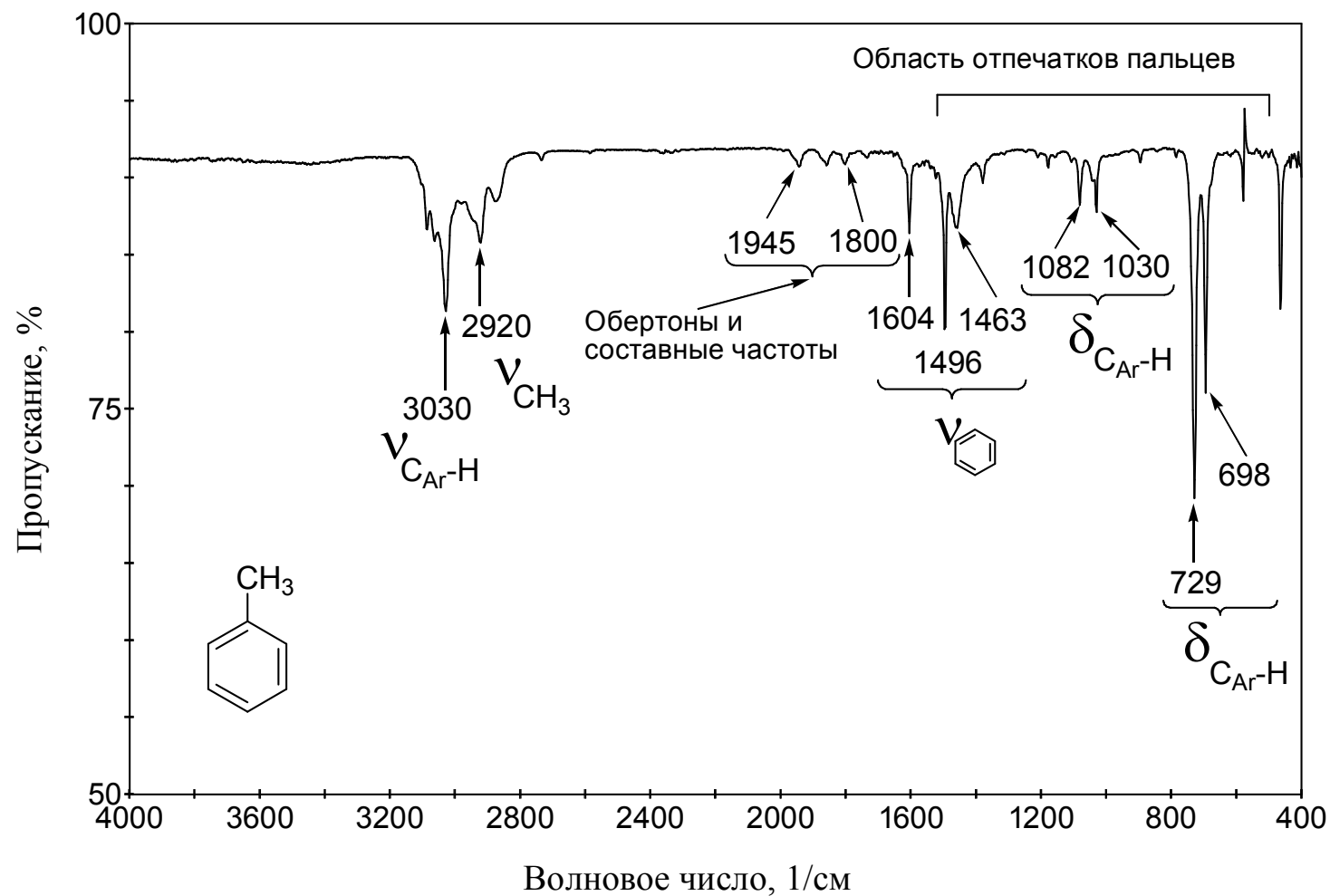
*полосы средней
интенсивности*

$$\delta_{\text{Сар.-Н}} = 900-720 \text{ см}^{-1}$$

внеплоскостные

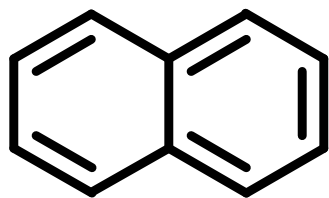
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр метилбензола (толуола)

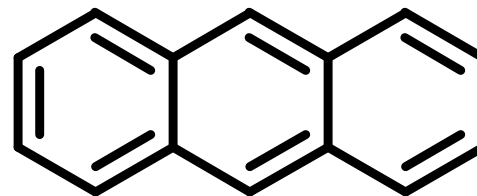


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

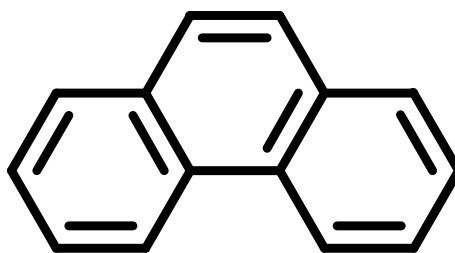
**ИК-спектры полициклических
ароматических углеводородов – производных
нафталина, антрацена и фенантрена – аналогичны
спектрам замещенных бензолов.**



нафталин



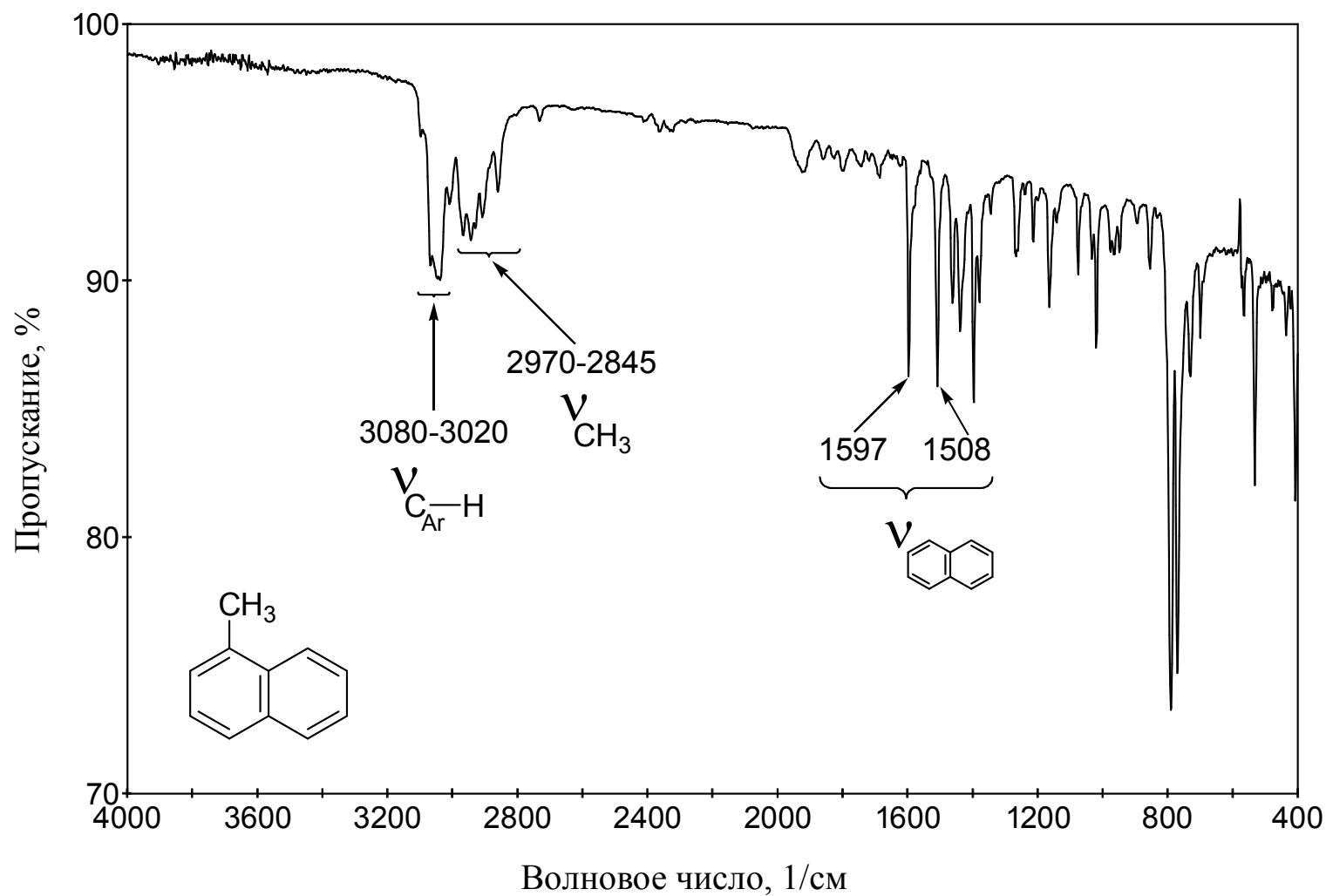
антрацен



фенантрен

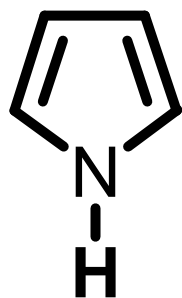
Особенности ИК- спектроскопии органических соединений

ИК-спектр 1-метилнафталина

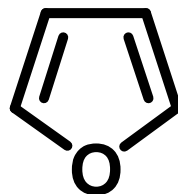


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

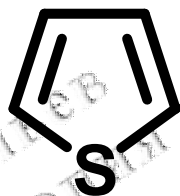
Гетероциклические ароматические соединения



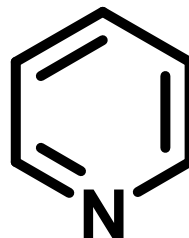
пиррол



фуран



тиофен



пиридин

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

**Валентные колебания связей $C_{\text{гетаром.}}-H$
в гетероароматических кольцах:**

$$\nu_{C_{\text{гетар.}}-H} = 3100-3000 \text{ см}^{-1}$$

*полосы средней
интенсивности*

**Валентные колебания связей $C_{\text{гетаром.}}=C_{\text{гетаром.}}$
в гетероароматических кольцах:**

$$\nu_{C_{\text{гетар.}}=C_{\text{гетар.}}} = 1660-1480 \text{ см}^{-1}$$

*полосы высокой
интенсивности*

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Деформационные колебания связей C_{гетаром.}-H в гетероароматических кольцах:

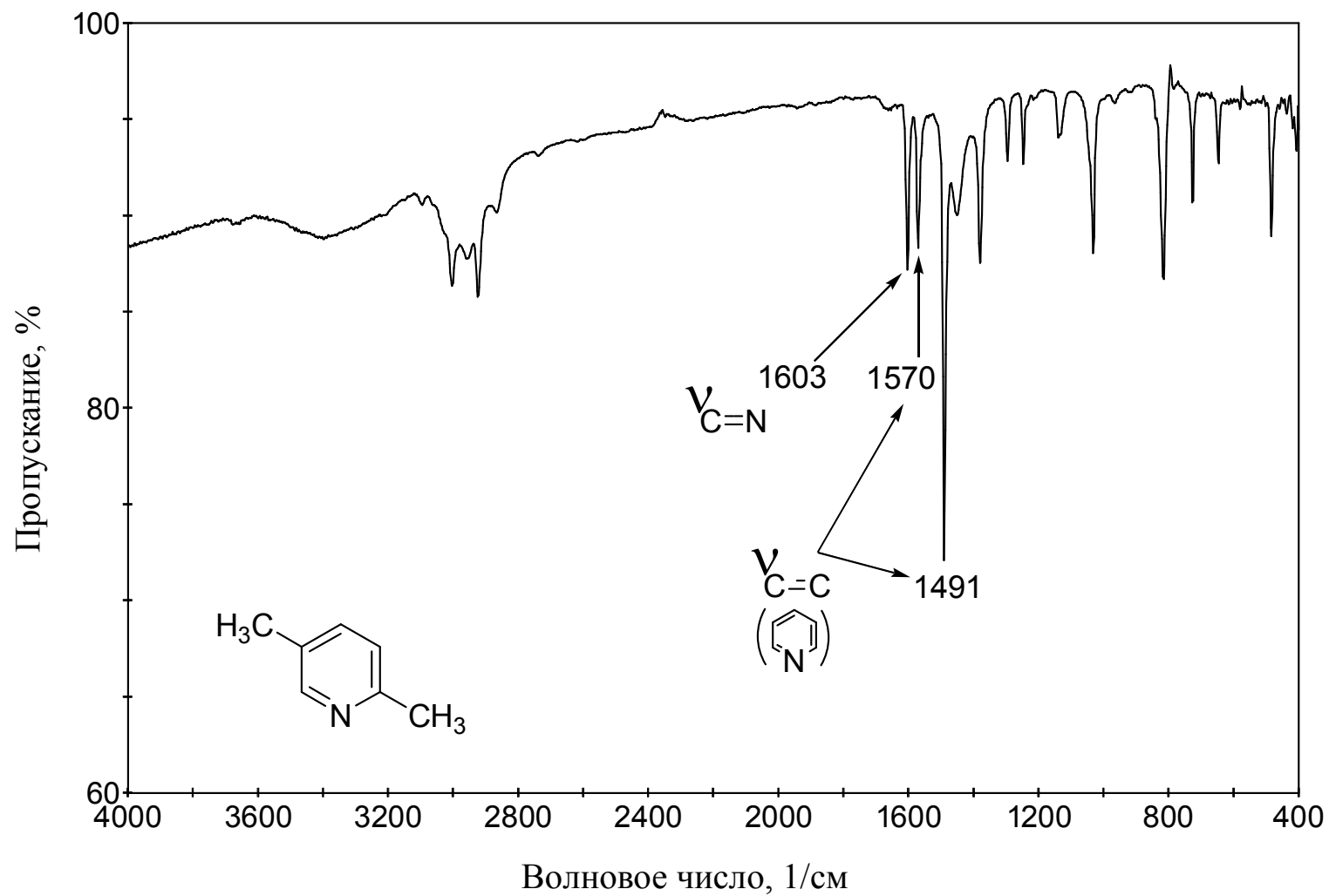
$\delta_{\text{Сар.-H}} = 770-710 \text{ см}^{-1}$ (пиррол)
плоскостные

*полосы средней
интенсивности*

$\delta_{\text{Сар.-H}} = 990-700 \text{ см}^{-1}$ (фуран, тиюфен)
внеплоскостные

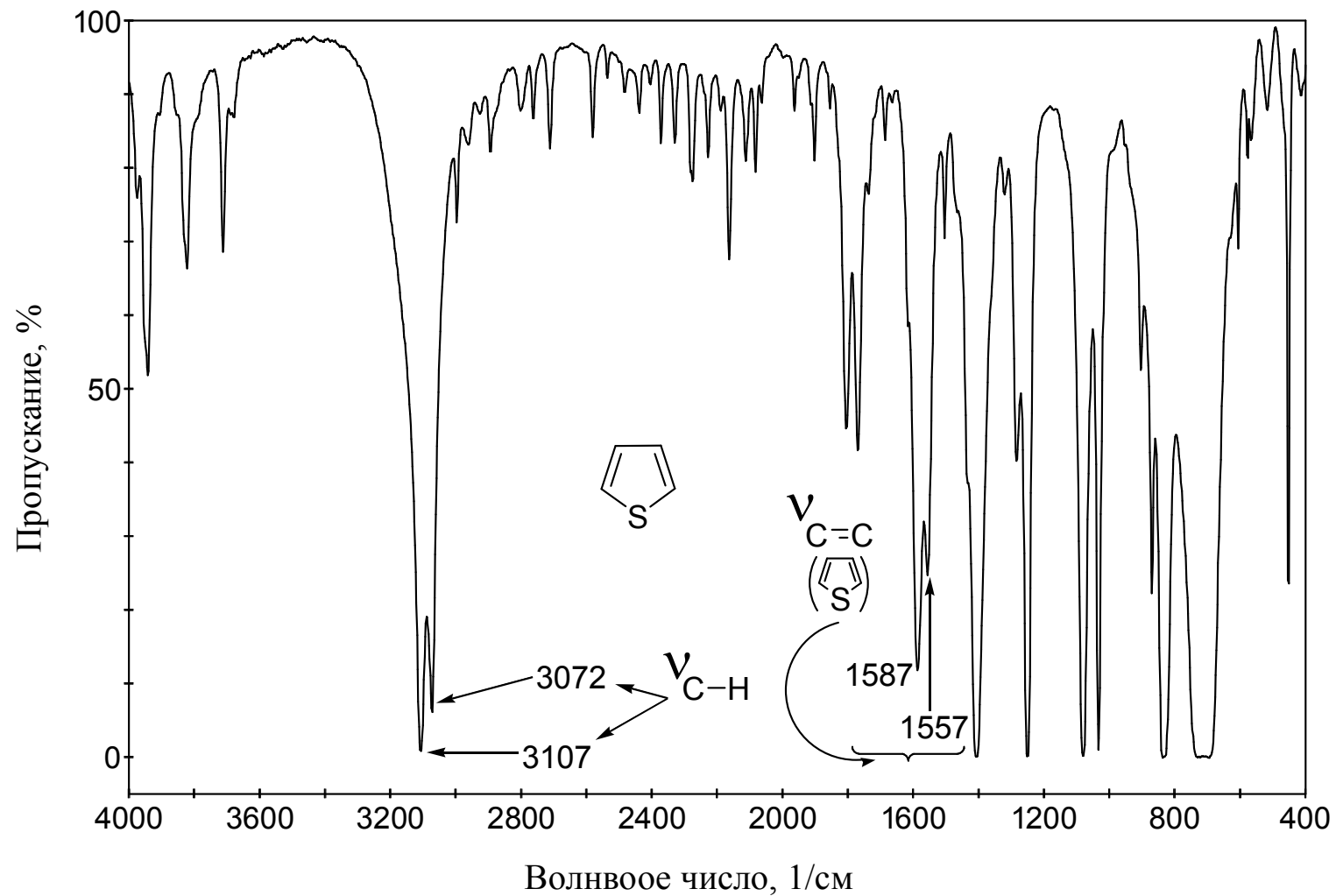
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр 2,5-диметилпиридина



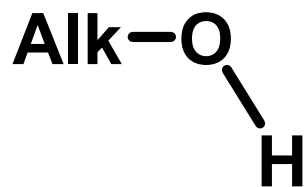
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр тиофена

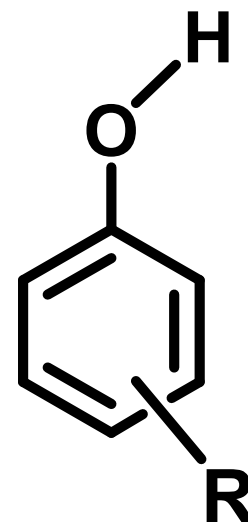


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Спирты и фенолы



алифатический
спирт



фенол

**ИК-характеристики спиртов и фенолов
определяются гидроксильной группой О-Н.**

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Колебания группы О-Н

1. Валентные колебания группы О-Н, несвязанной водородной связью:

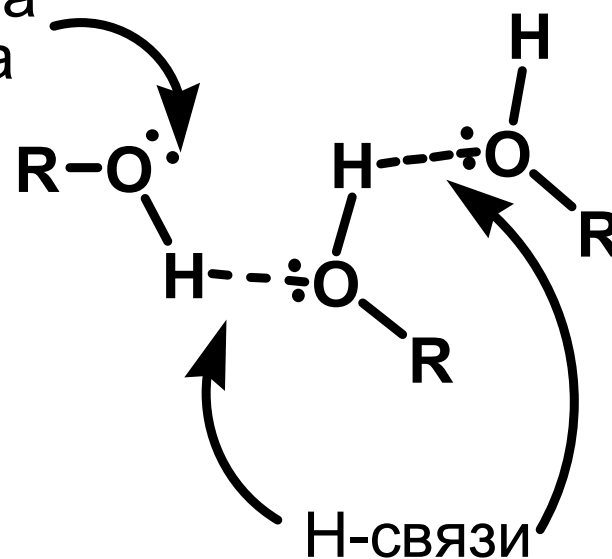
$$\nu_{\text{O-H}} = 3650-3580 \text{ см}^{-1}$$

свободная

*узкая полоса высокой
интенсивности*

2. Группа О-Н, связанная водородной связью.

неподелённая
электронная пара
атома кислорода



**Валентные колебания группы О-Н, связанной
водородной связью:**

$$\nu_{\text{O-H}} = 3550-3450 \text{ см}^{-1} \text{ (димеры)}$$

связанная

*широкие полосы средней
интенсивности*

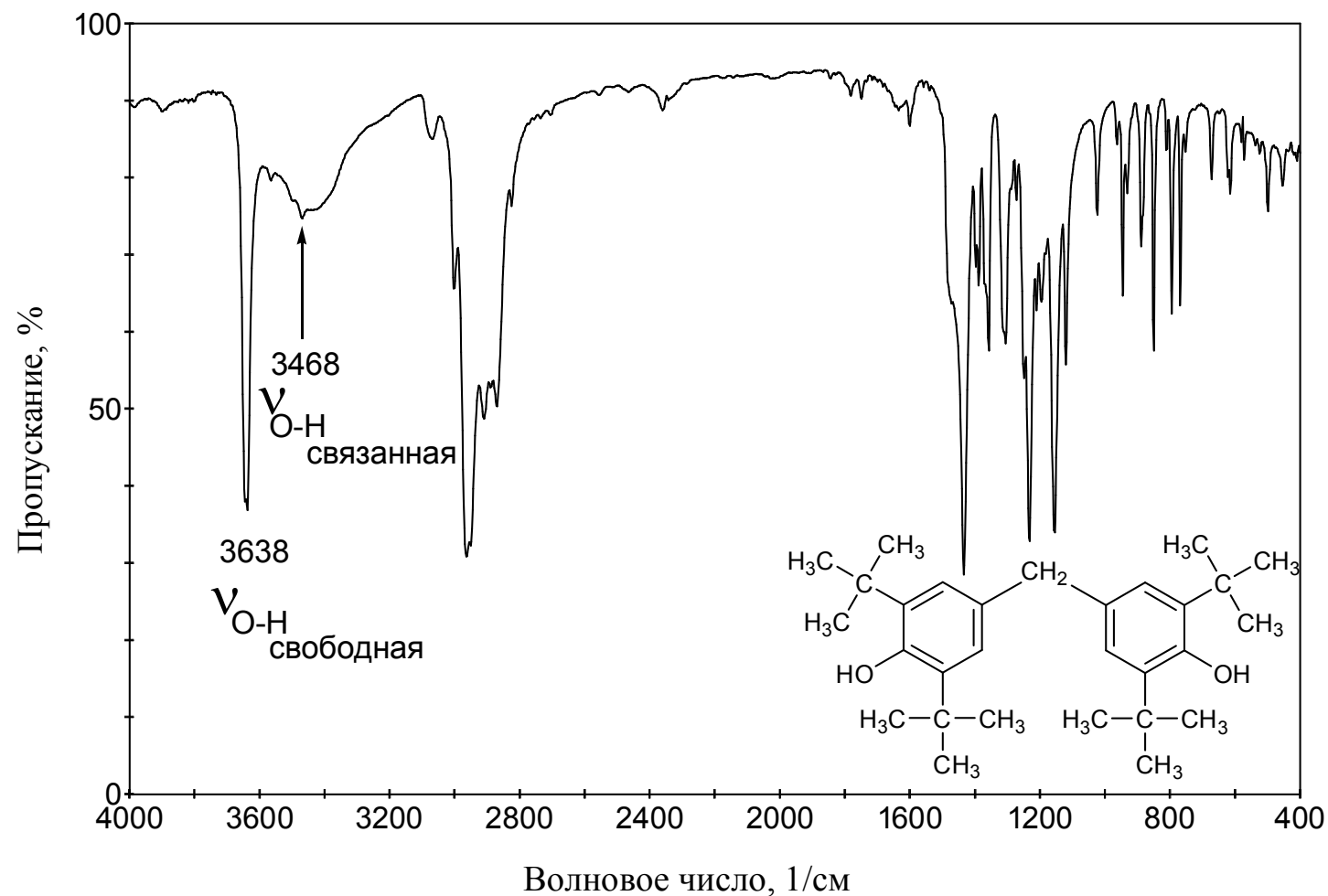
$$\nu_{\text{O-H}} = 3400-3200 \text{ см}^{-1} \text{ (олигомерные)}$$

связанная

ассоциаты

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр стерически затруднённого фенола



Особенности ИК- спектроскопии органических соединений

Деформационные колебания связей О-Н:

$$\delta_{\text{O-H}} = 750-650 \text{ см}^{-1}$$

внеплоскостные

полосы средней
интенсивности

Спирт, фенол

$\delta_{\text{O-H}}, \text{ см}^{-1}$

полосы высокой
интенсивности

плоскостные

RCH_2OH (первичные)

1350-1250

R_2CHOH (вторичные)

1350-1260

R_3COH (третичные)

1450-1310

ArOH (фенолы)

1410-1310

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Валентные колебания простых связей С-О:

$$\nu_{\text{C-O}} = 1260-1000 \text{ см}^{-1}$$

*полосы высокой
интенсивности*

Спирт, фенол

$\nu_{\text{C-O}}, \text{ см}^{-1}$

RCH_2OH (первичные)

1075-1000

R_2CHOH (вторичные)

1125-1000

R_3COH (третичные)

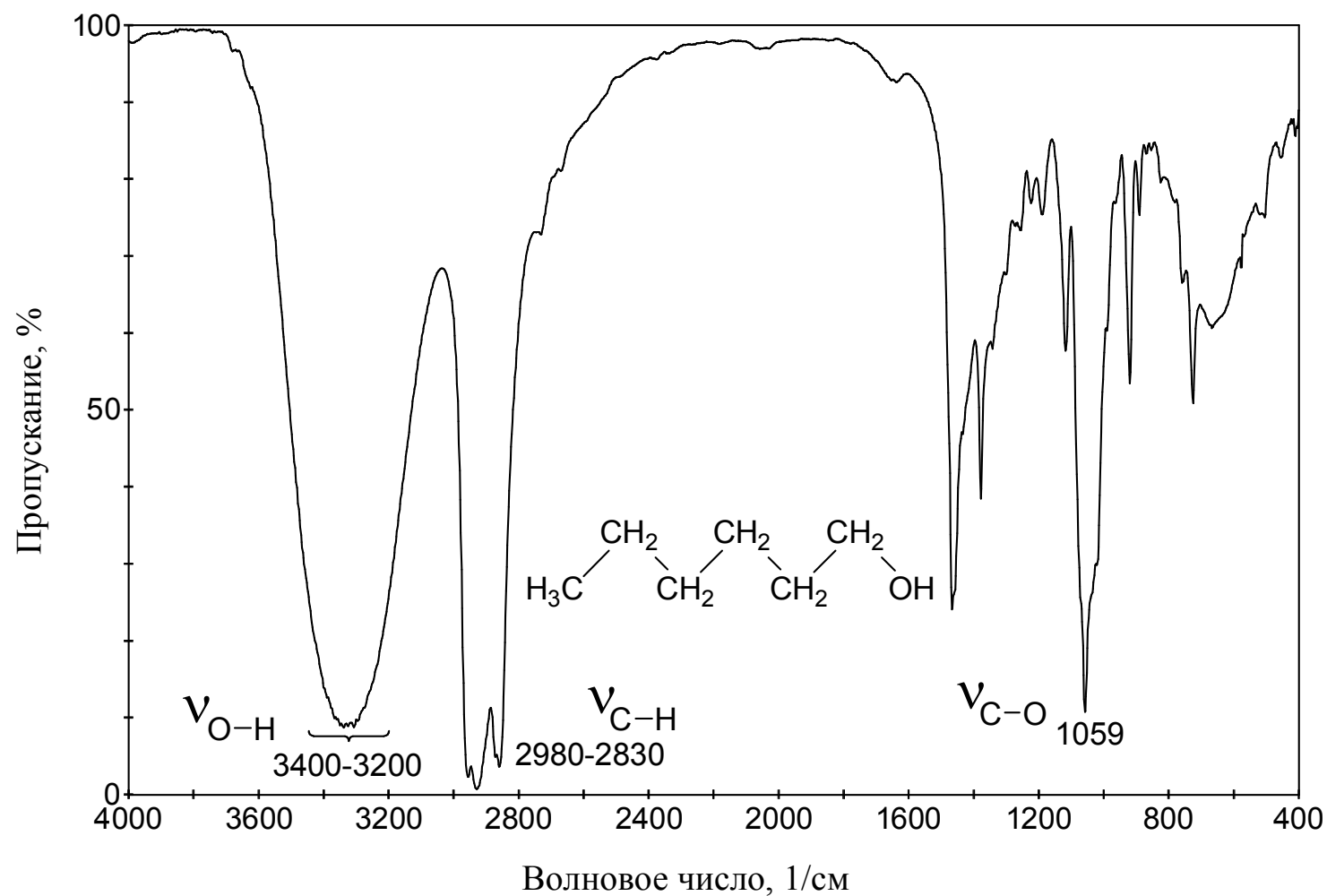
1210-1100

ArOH (фенолы)

1260-1180

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр гексанола-1

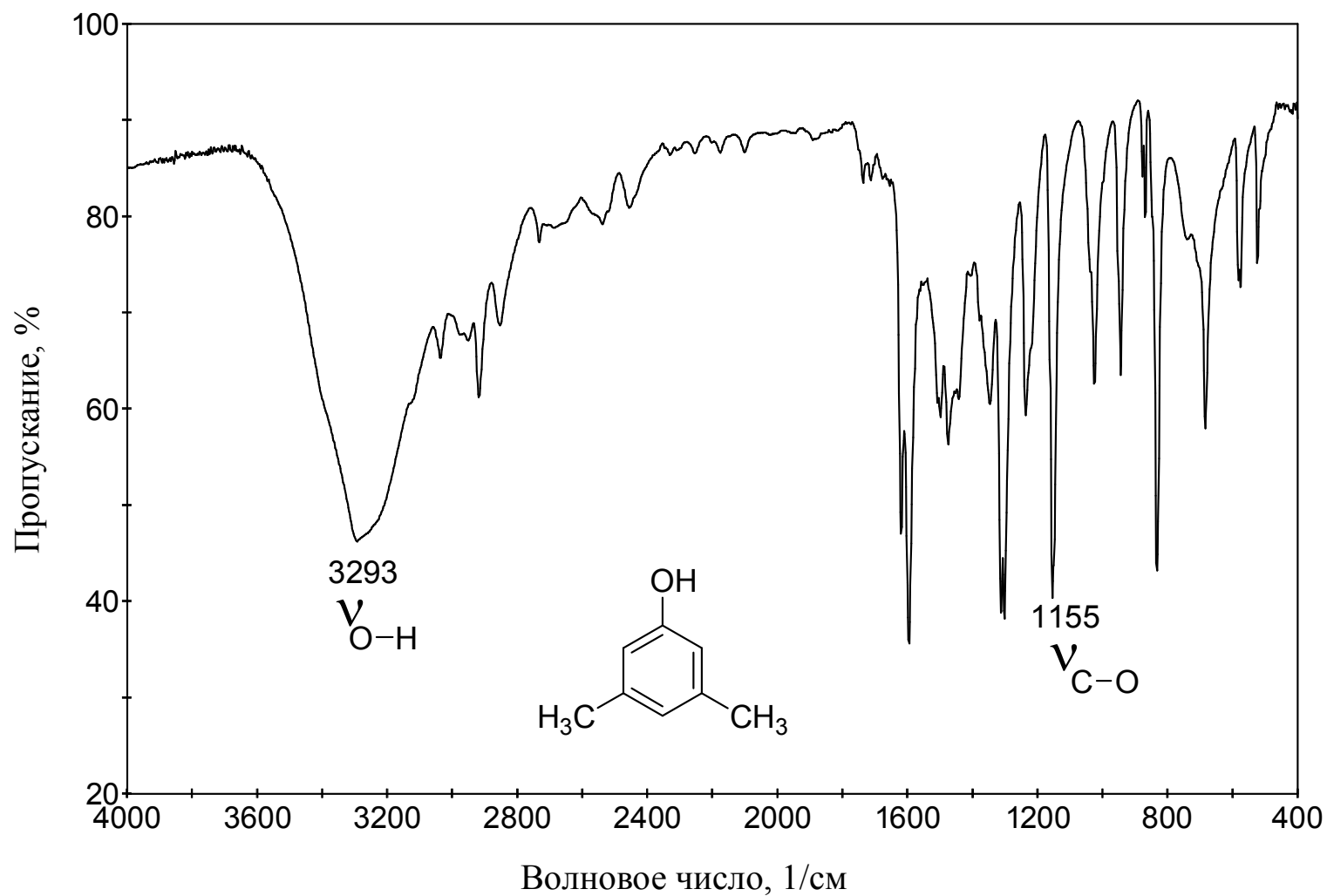


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ВАСИЛЬЕВ
КОПИЯ

ИК-спектр 3,5-диметилфенола

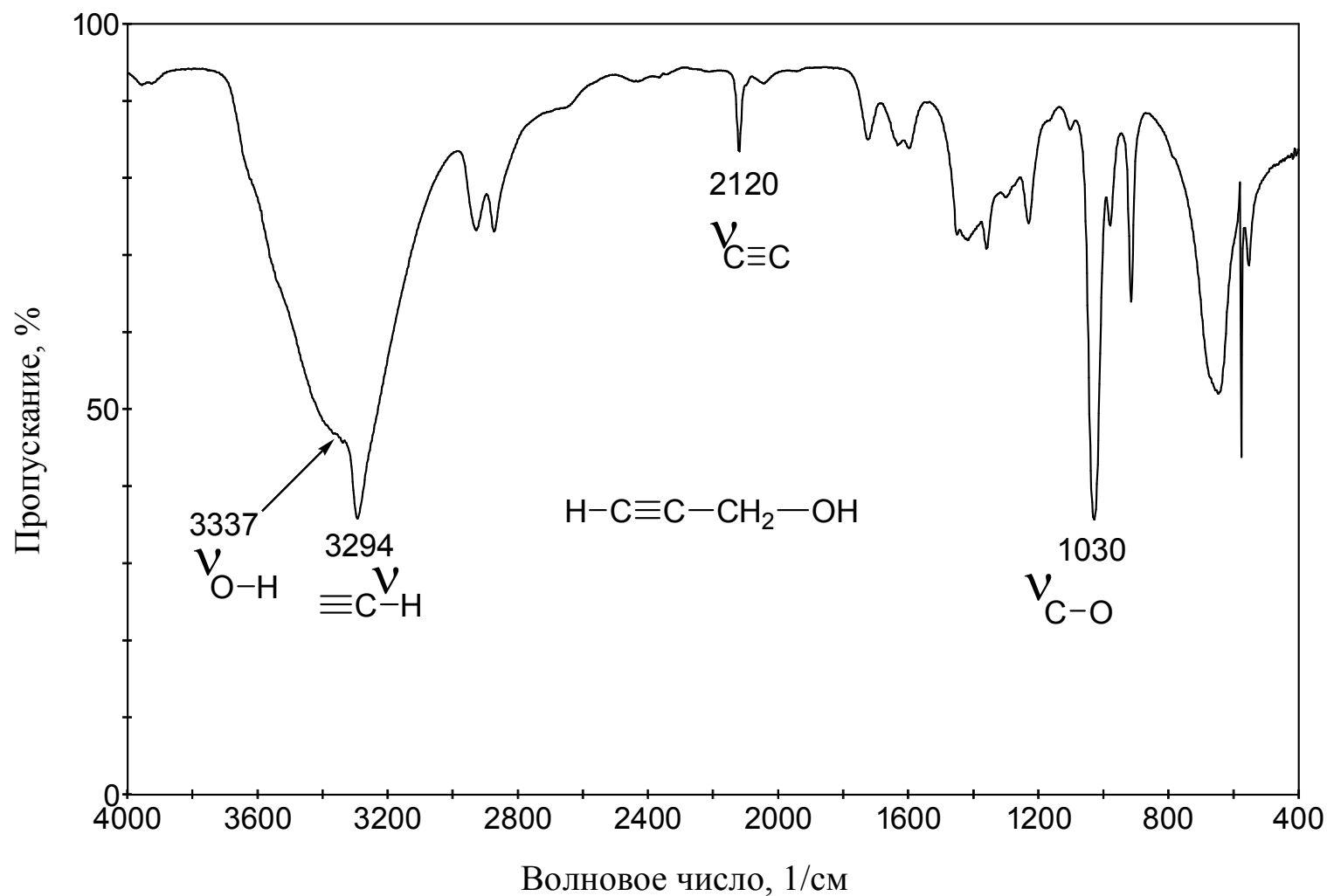
ВАСИЛЬЕВ
КОПИЯ



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

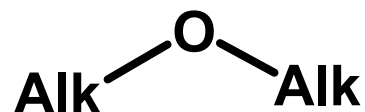
Спектр

ИК-спектр пропаргилового спирта

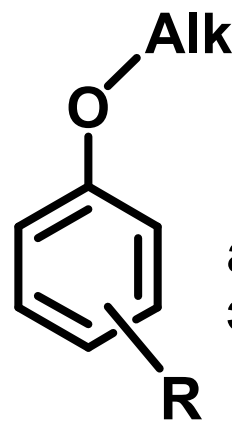


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Простые эфиры



диалкиловые
эфиры



алкилариловые
эфиры

Триада C-O-C:

$$\nu_{\text{C-O-C}} = 1290-1030 \text{ см}^{-1}$$

полосы высокой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Диалкиловые эфиры Alk-O-Alk:

$$\nu_{\text{C-O-C}} = 1170-1115 \text{ см}^{-1}$$

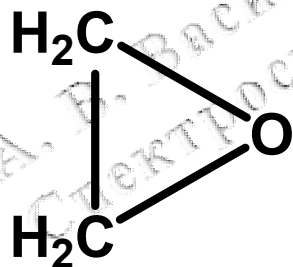
Алкилариловые и виниловые эфиры

Ar-O-Alk, C=C-O-Alk:

$$\nu_{\text{C-O-C}} = 1270-1230 \text{ см}^{-1}$$

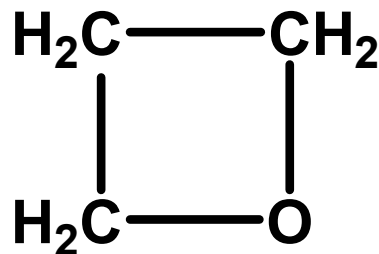
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Циклические простые эфиры



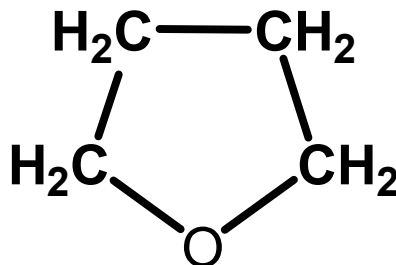
оксиран

$$\nu_{\text{C-O-C}} = 1270-1230 \text{ см}^{-1}$$



оксетан

$$\begin{aligned} \nu_{\text{C-O-C}} &= 1030 \text{ см}^{-1} \\ &980 \text{ см}^{-1} \end{aligned}$$

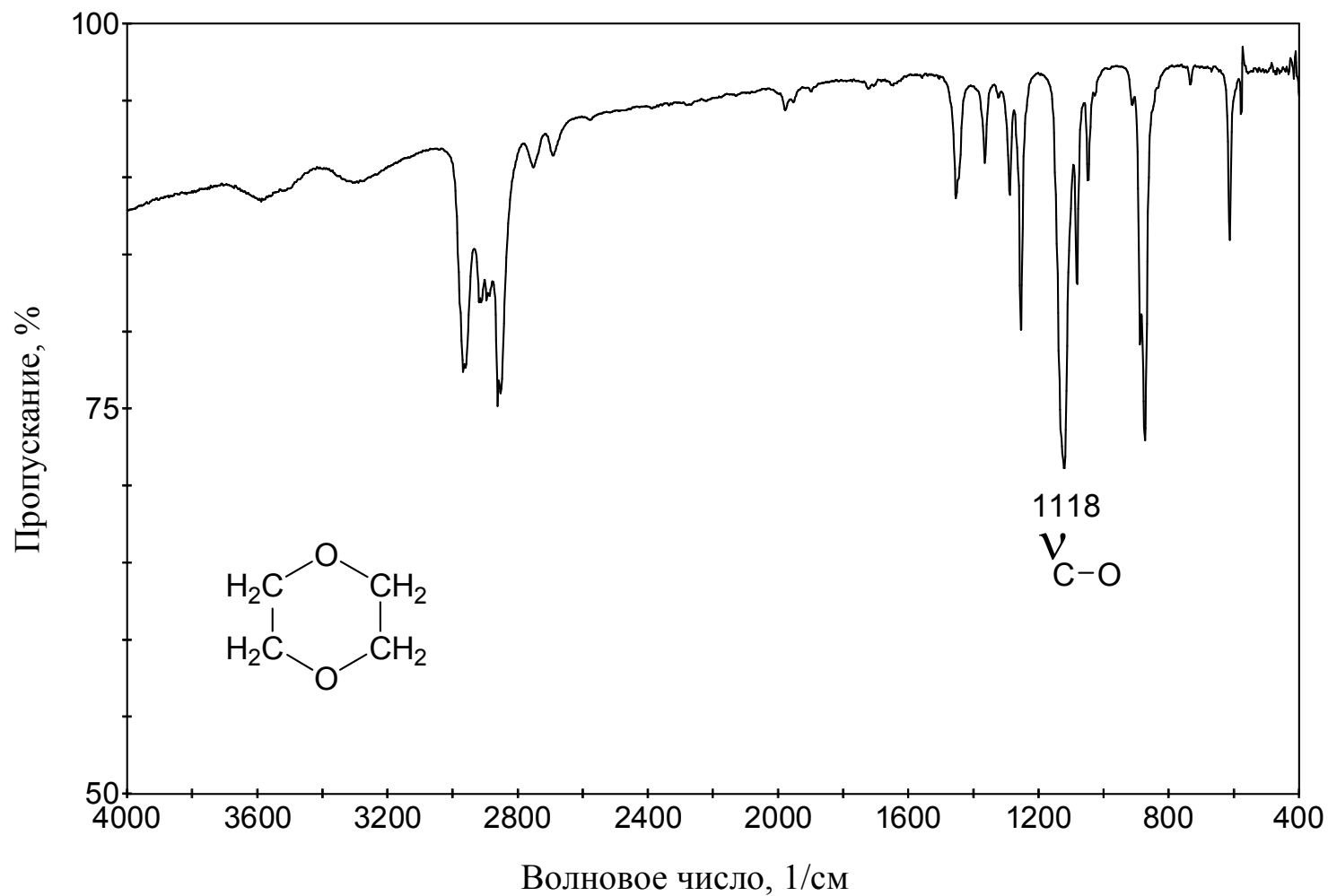


тетрагидрофуран

$$\begin{aligned} \nu_{\text{C-O-C}} &= 1070 \text{ см}^{-1} \\ &915 \text{ см}^{-1} \end{aligned}$$

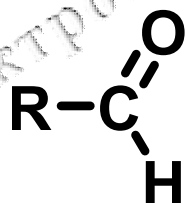
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр 1,4-диоксана

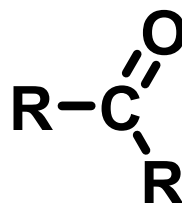


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Карбонильные соединения



альдегиды



кетоны

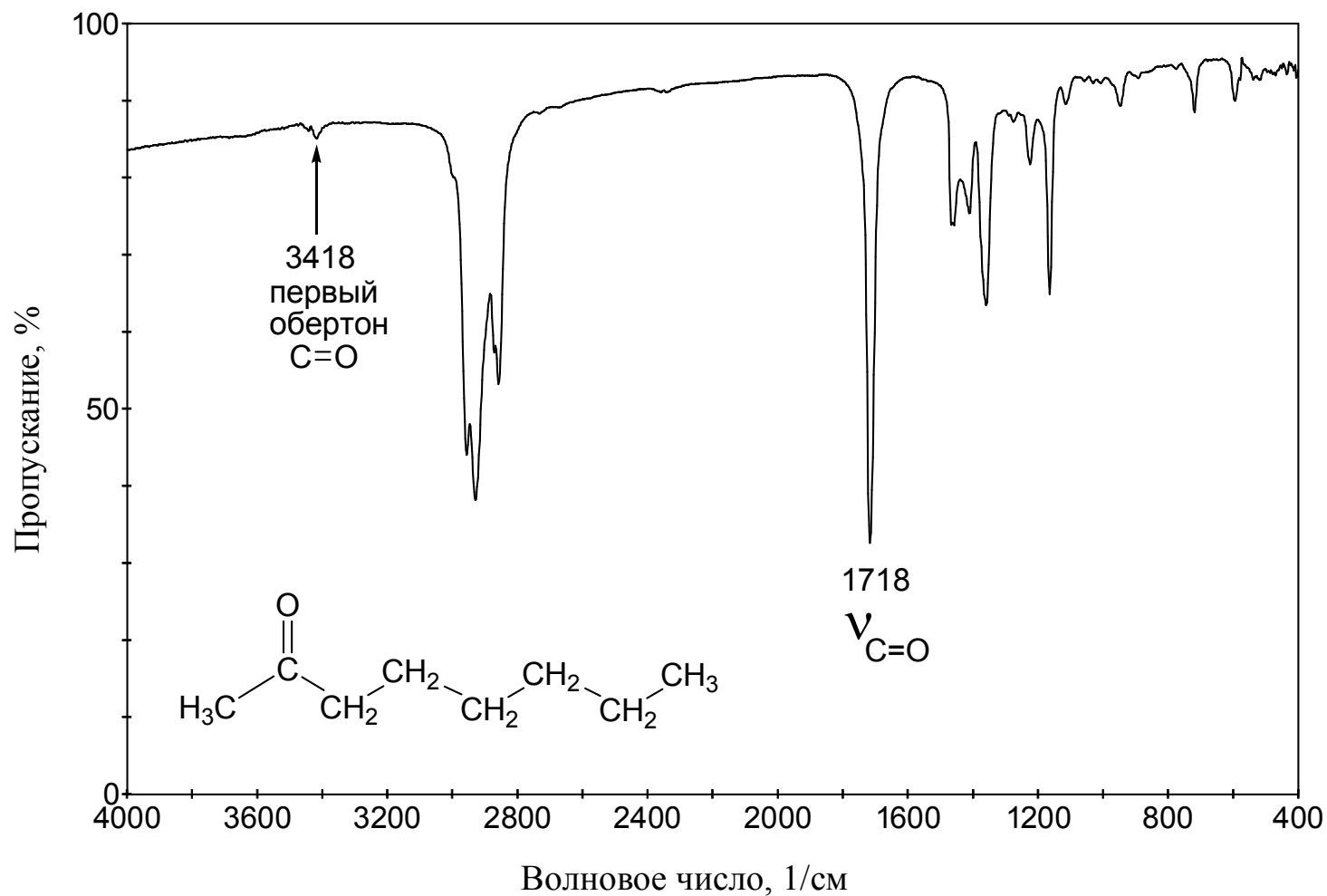
Валентные колебания карбонильной группы:

$\nu_{\text{C=O}} = 1775-1645 \text{ см}^{-1}$ *полоса высокой интенсивности*
положение полосы зависит от характера группы C=O
и её молекулярного окружения

Первый обертона $\nu_{\text{C=O}} = 3400-3200 \text{ см}^{-1}$

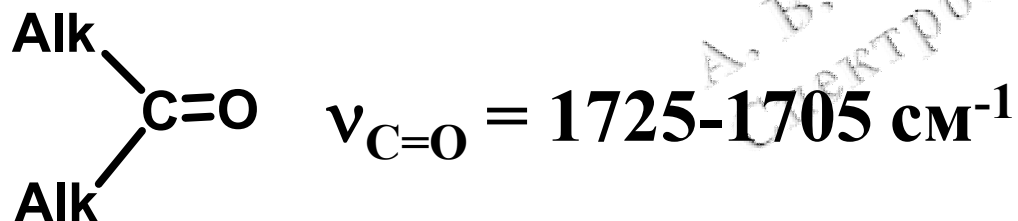
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр октанона-2

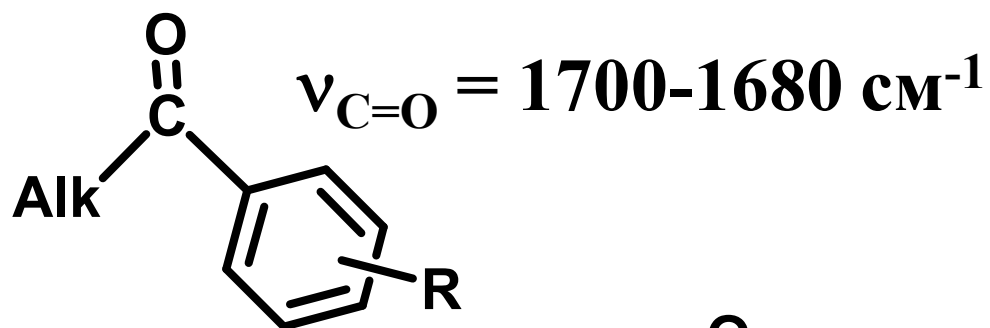


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

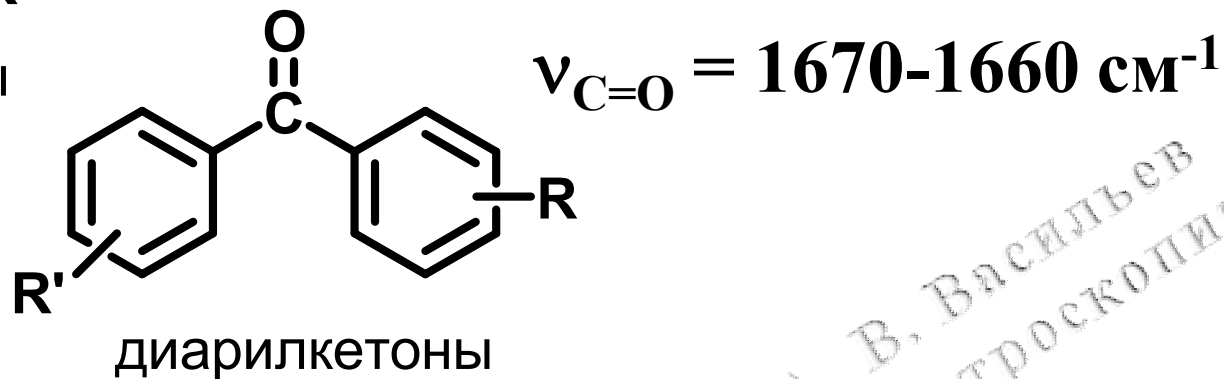
Кетоны



диалкилкетоны

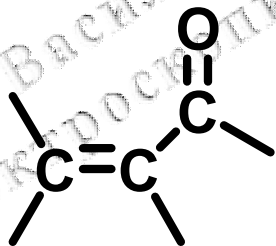


алкиларилкетоны



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

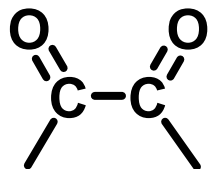
А. В. Васильев
Спектроскопия



еноны

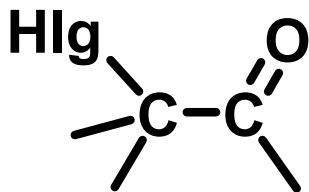
$$\nu_{\text{C=O}} = 1685-1665 \text{ см}^{-1}$$

А. В. Васильев
Спектроскопия



α-дикетоны

$$\nu_{\text{C=O}} = 1730-1710 \text{ см}^{-1}$$



α-галогенкетоны

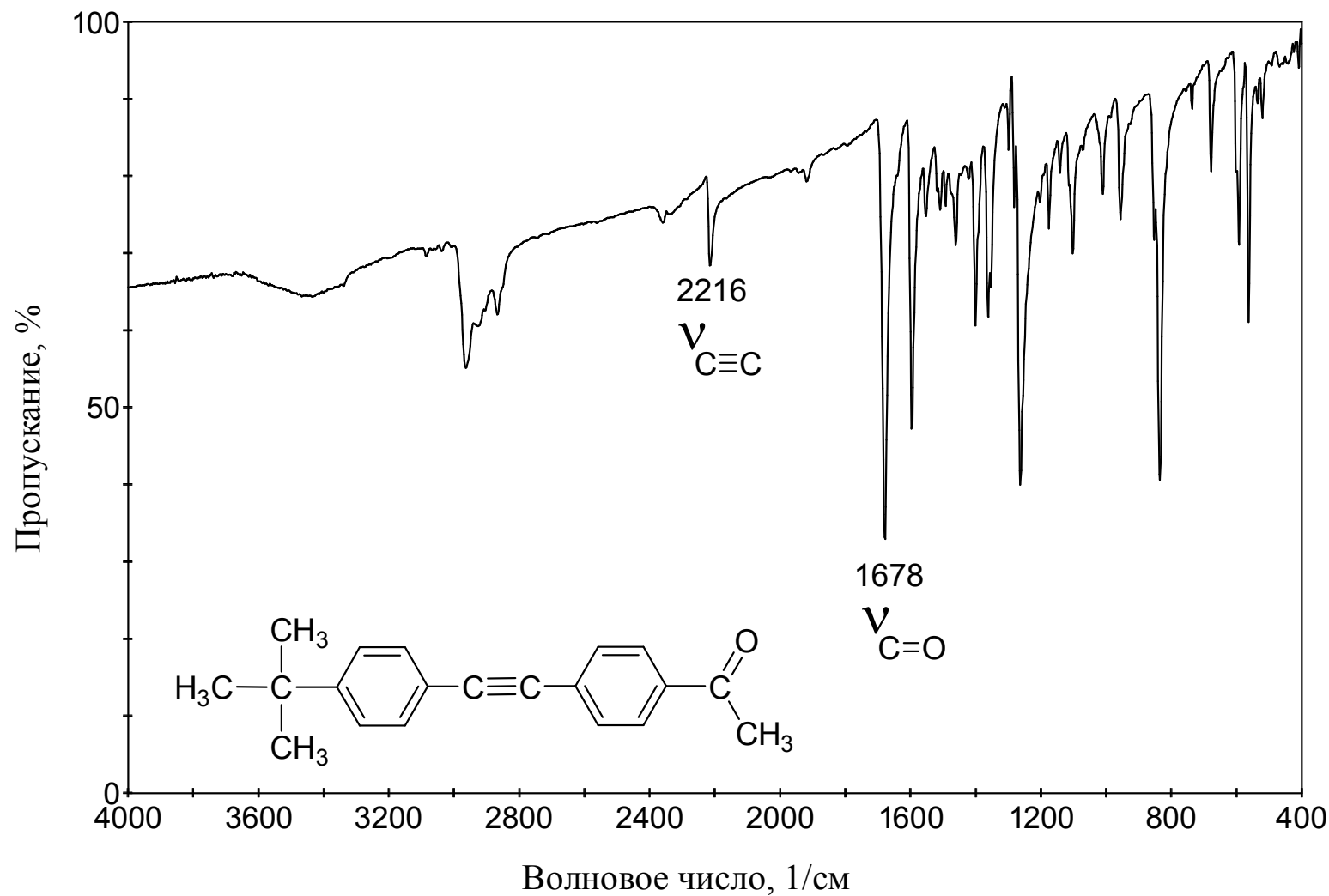
$$\nu_{\text{C=O}} = 1745-1725 \text{ см}^{-1}$$

А. В. Васильев
Спектроскопия

А. В. Васильев
Спектроскопия

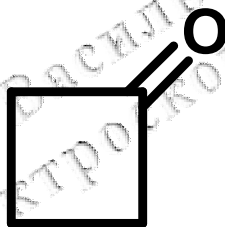
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр ацетиленового кетона



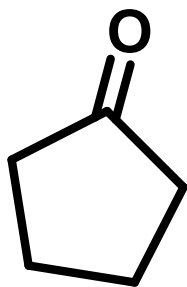
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Циклические кетоны



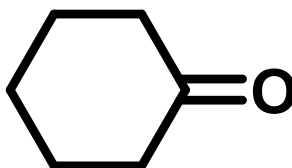
циклобутанон

$$\nu_{\text{C=O}} = 1775 \text{ см}^{-1}$$



циклопентанон

$$\nu_{\text{C=O}} = 1750\text{-}1740 \text{ см}^{-1}$$

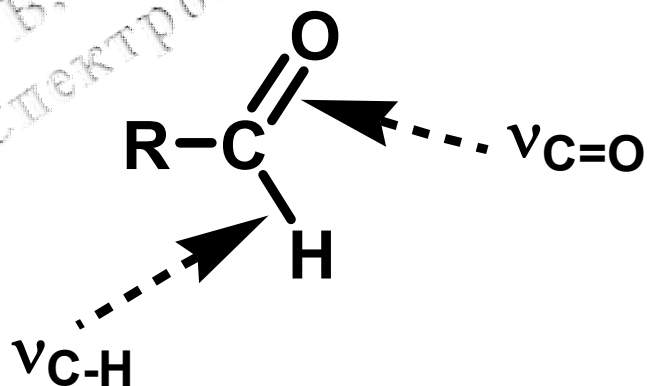


циклогексанон

$$\nu_{\text{C=O}} = 1725\text{-}1705 \text{ см}^{-1}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Альдегиды



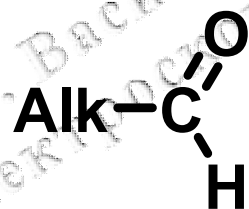
$$\begin{array}{l} \nu_{C-H} = 2830-2810 \text{ см}^{-1} \\ \text{альдегид} \quad 2750-2690 \text{ см}^{-1} \end{array}$$

две полосы слабой интенсивности,
характерные только для альдегидов

$$\begin{array}{l} \delta_{C-H} = 975-780 \text{ см}^{-1} \\ \text{альдегид} \end{array}$$

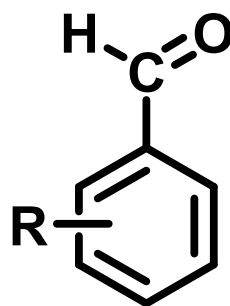
полоса слабой
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений



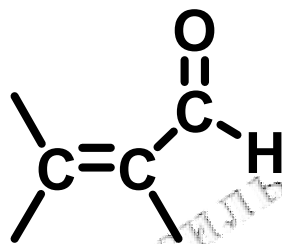
$$\nu_{\text{C}=\text{O}} = 1740-1720 \text{ см}^{-1}$$

алканоали



$$\nu_{\text{C}=\text{O}} = 1715-1685 \text{ см}^{-1}$$

ароматические
альдегиды

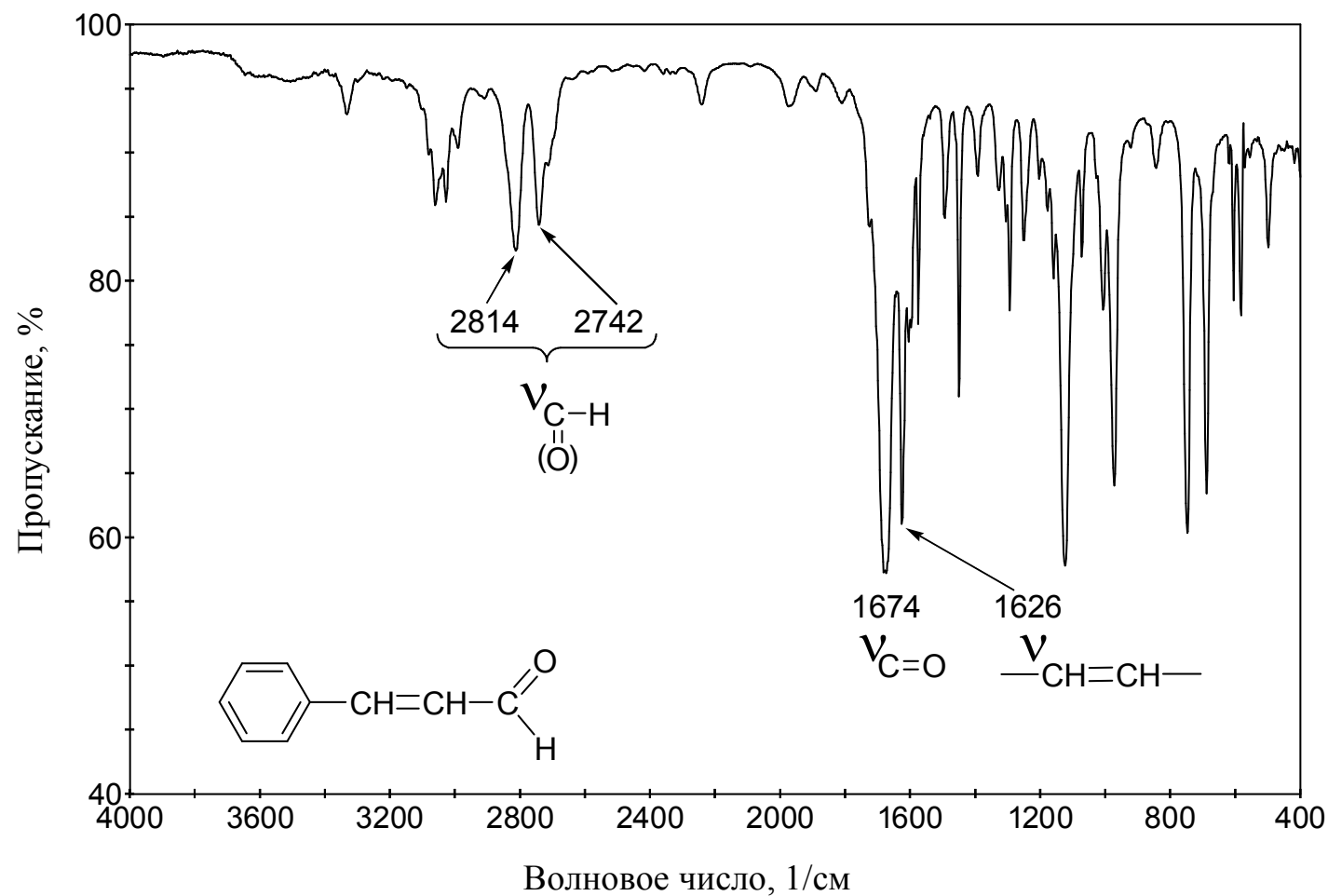


$$\nu_{\text{C}=\text{O}} = 1705-1670 \text{ см}^{-1}$$

енали

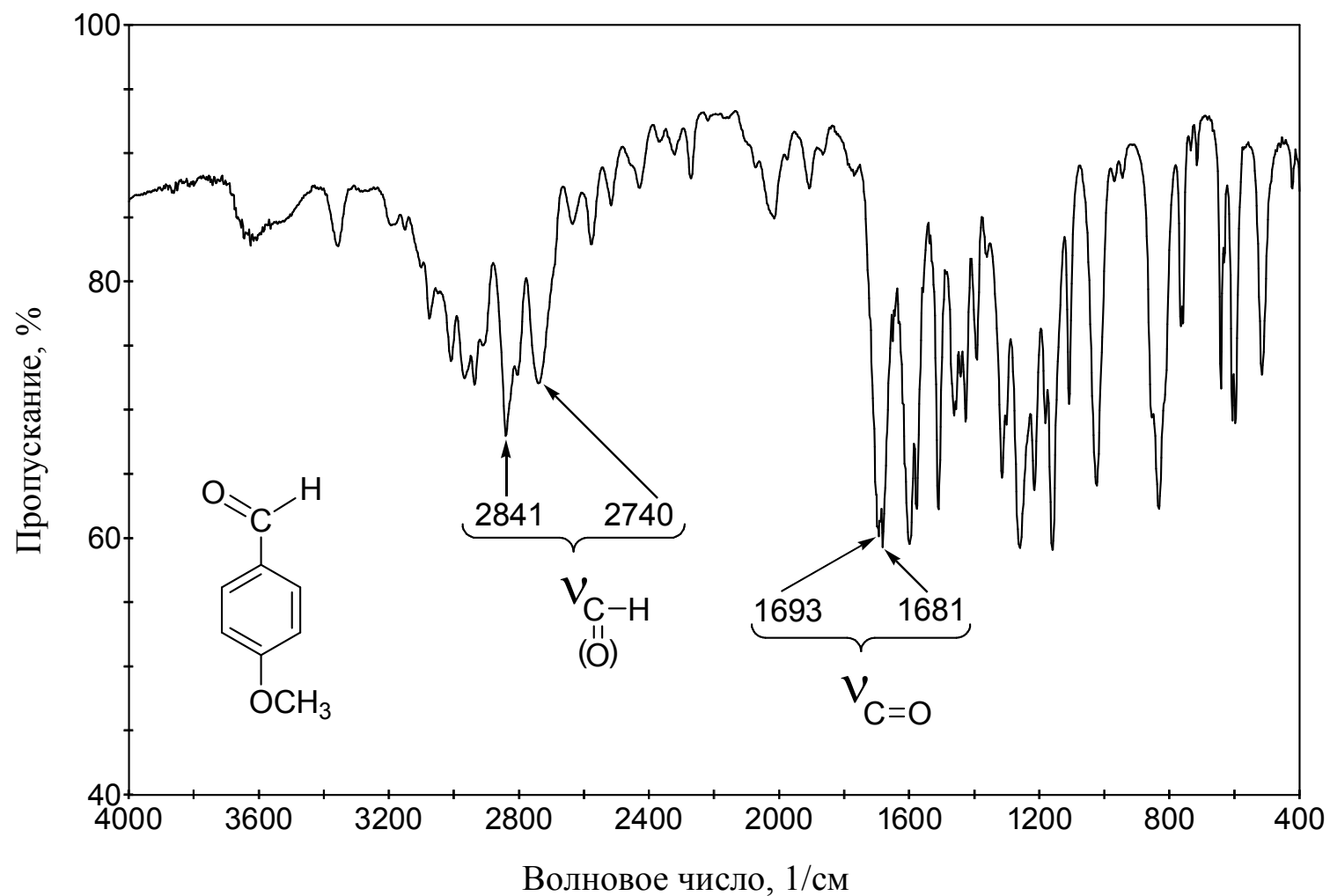
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр коричневого альдегида



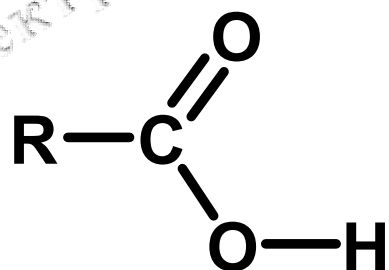
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр анисового альдегида

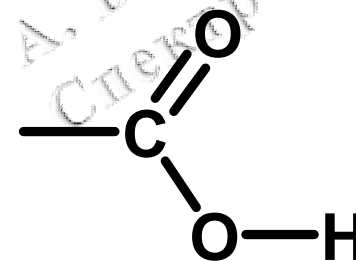


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

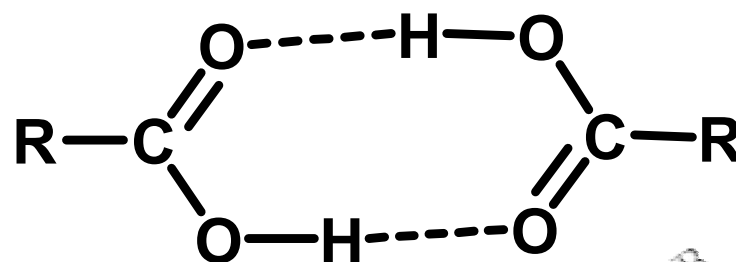
Карбоновые кислоты



карбоксильная
группа



Молекулы карбоновых кислот образуют между собой сильные водородные связи. Димеры карбоновых кислот стабильны даже в газовой фазе.



димер, связанный
водородной связью

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Колебания гидроксильной группы:

$\nu_{\text{O-H}} = 3560-3500 \text{ см}^{-1}$
свободная

*полоса средней
интенсивности*

$\nu_{\text{O-H}} = 3000-2500 \text{ см}^{-1}$
связанная

*очень широкая полоса
высокой интенсивности*

$\delta_{\text{O-H}} = 950-900 \text{ см}^{-1}$
внеплоскостные

*полоса средней
интенсивности*

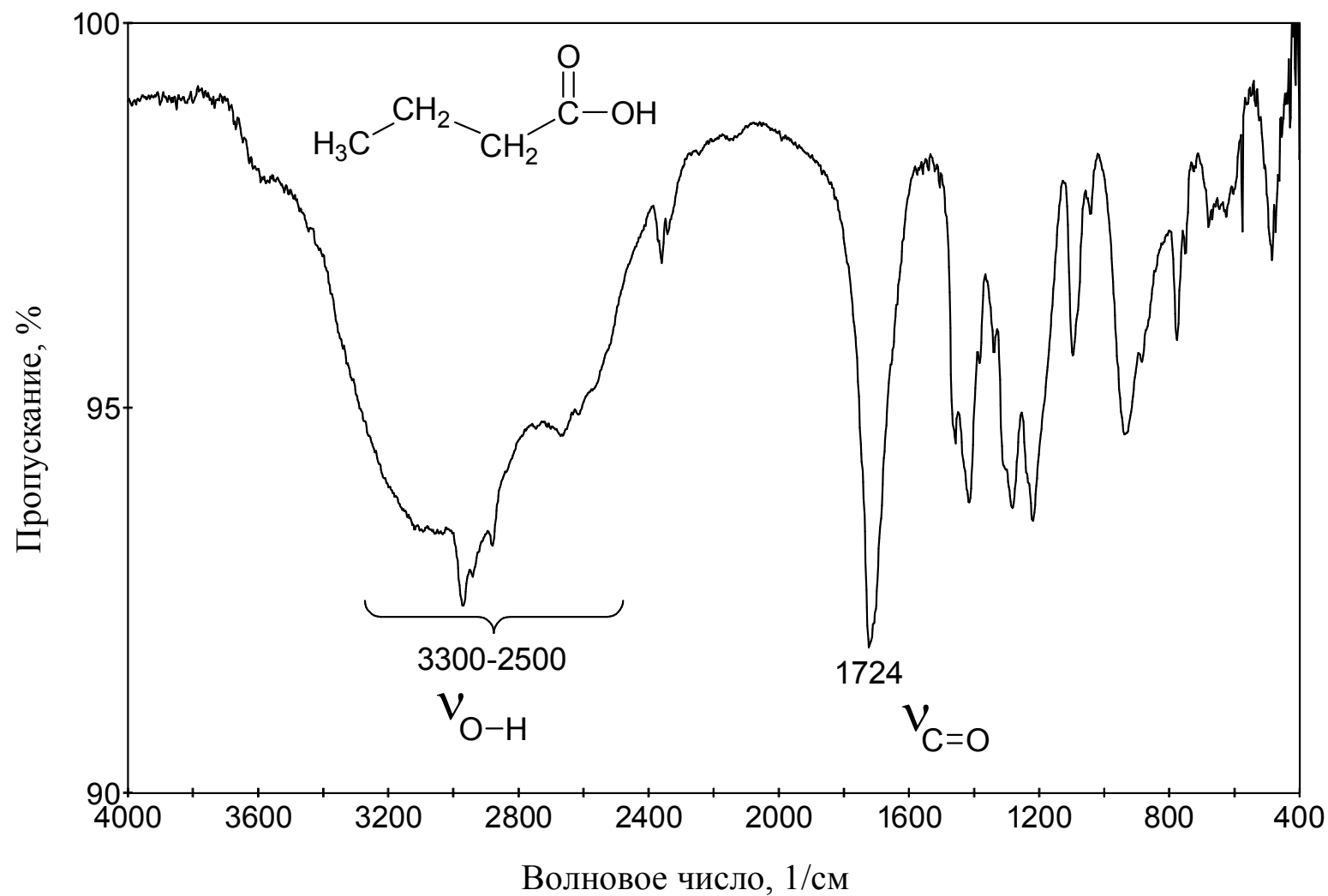
Валентные колебания карбонильной группы:

$\nu_{\text{C=O}} = 1740-1650 \text{ см}^{-1}$

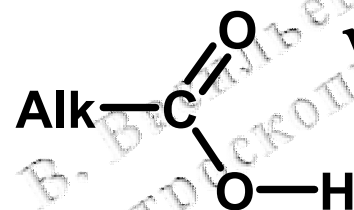
*полосы высокой
интенсивности*

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр бутановой кислоты

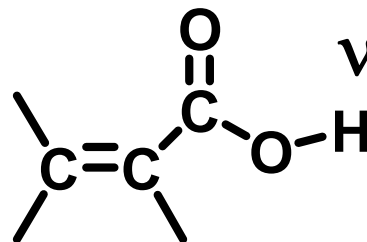


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений



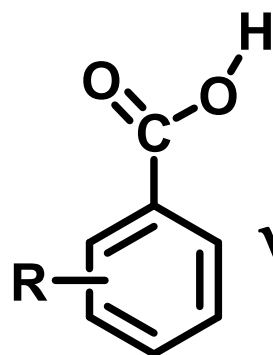
насыщенные
кислоты

$$\nu_{\text{C=O}} = 1725-1700 \text{ см}^{-1}$$



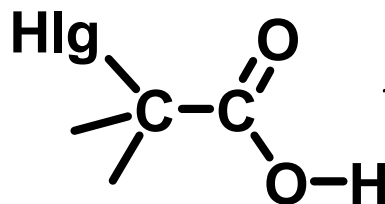
α,β -непредельные

$$\nu_{\text{C=O}} = 1715-1690 \text{ см}^{-1}$$



ароматические
кислоты

$$\nu_{\text{C=O}} = 1700-1680 \text{ см}^{-1}$$

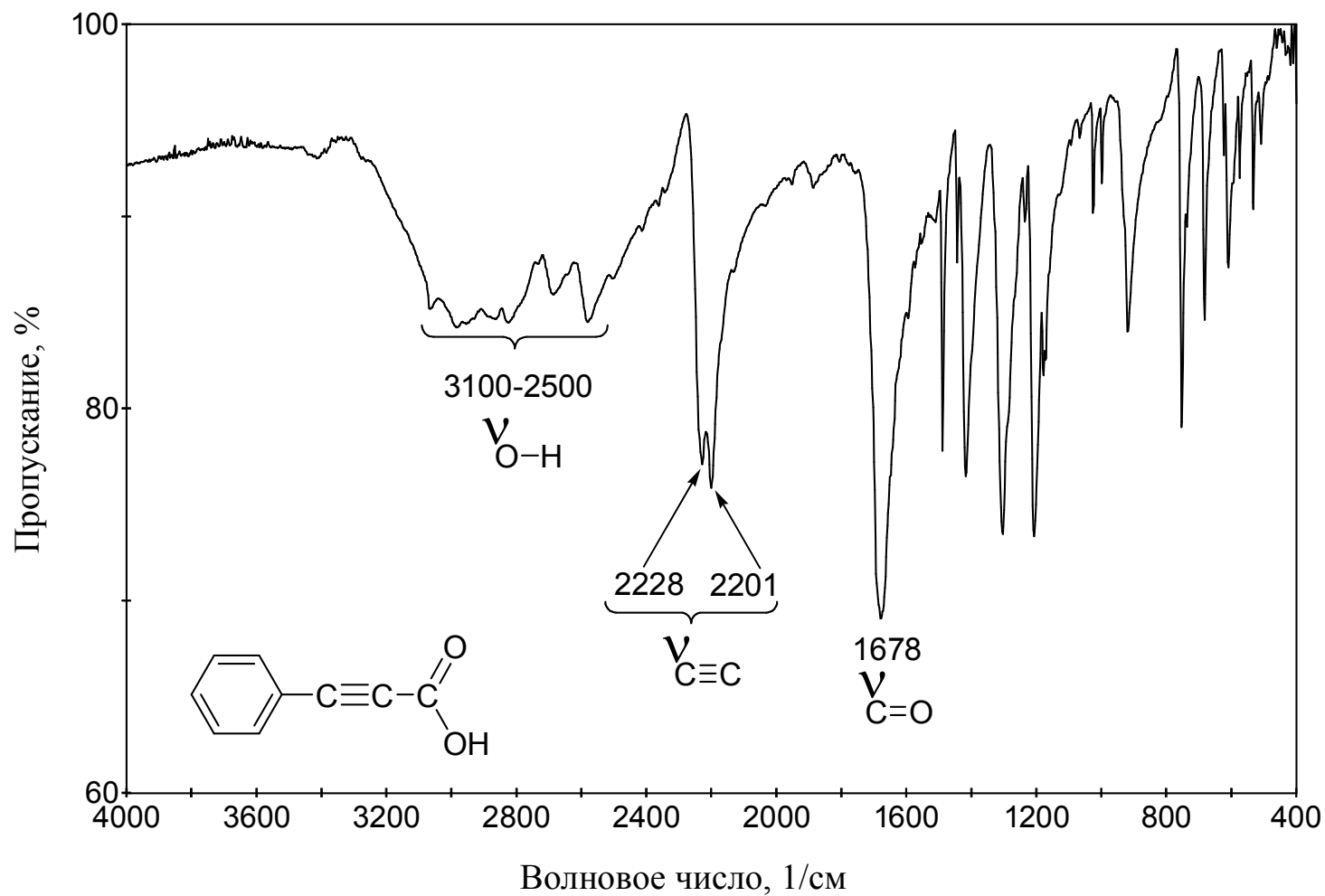


α -галогензамещённые

$$\nu_{\text{C=O}} = 1740-1720 \text{ см}^{-1}$$

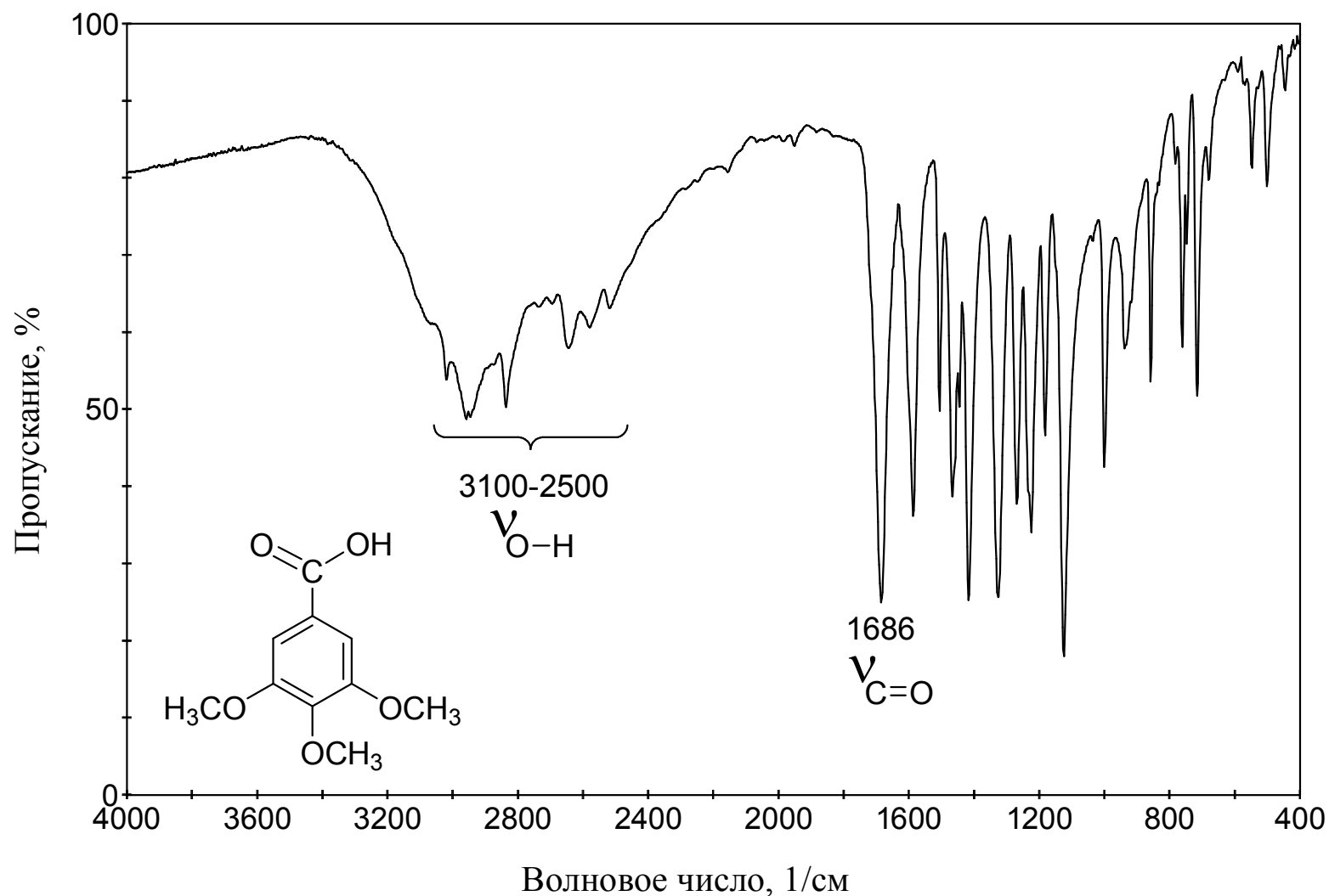
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр фенилпропиоловой кислоты



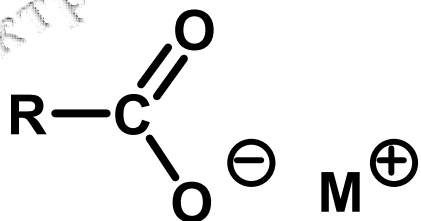
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр 3,4,5-триметоксибензойной кислоты



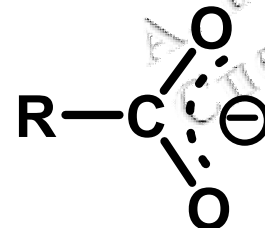
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Соли карбоновых кислот



анион
кислоты

катион
металла



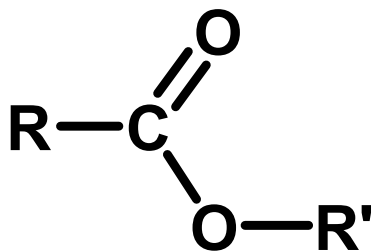
карбоксилат
анион

$$\nu_{\text{CO}_2^-} = \begin{array}{ll} 1610-1550 \text{ см}^{-1} & \text{асимм.} \\ 1450-1400 \text{ см}^{-1} & \text{симм.} \end{array}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Производные карбоновых кислот

Сложные эфиры



$$\nu_{\text{C=O}} = 1750-1735 \text{ см}^{-1}$$

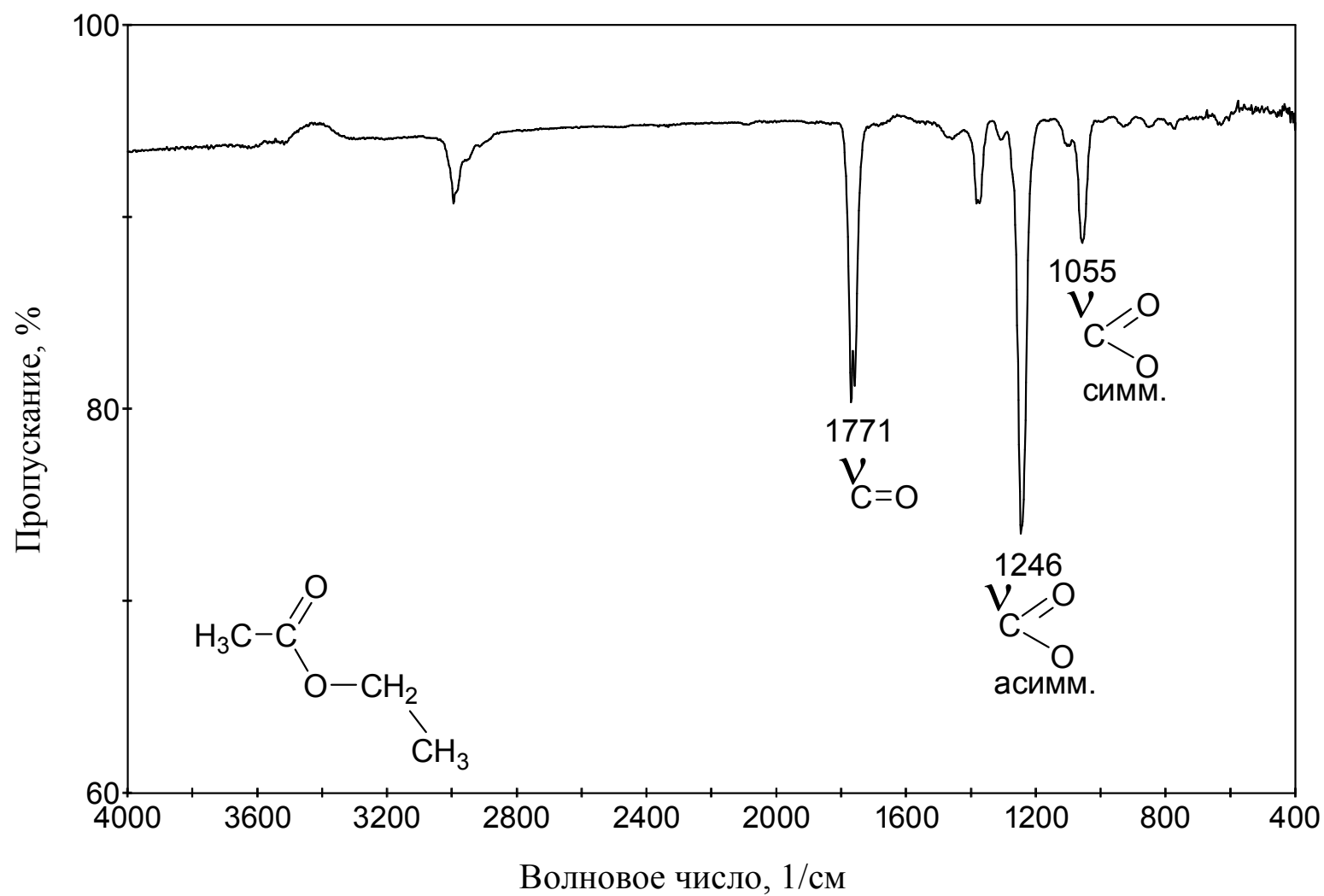
Эфиры алифатических
кислот $\text{R} = \text{Alk}$

$$\nu_{\text{C-O}} = 1330-1050 \text{ см}^{-1}$$

Две интенсивные полосы симметричного и
асимметричного колебаний C-O связей группы
 CO_2

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

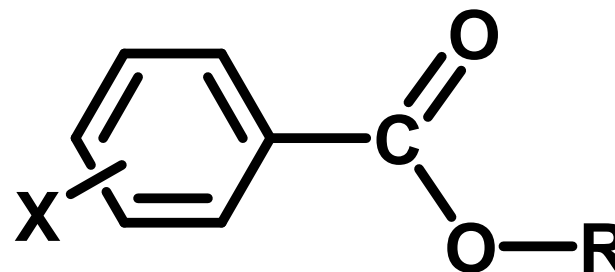
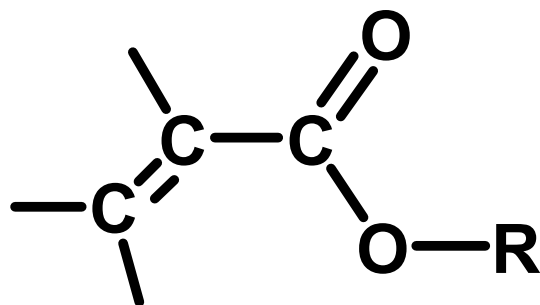
ИК-спектр этилацетата



Особенности ИК- спектроскопии органических соединений

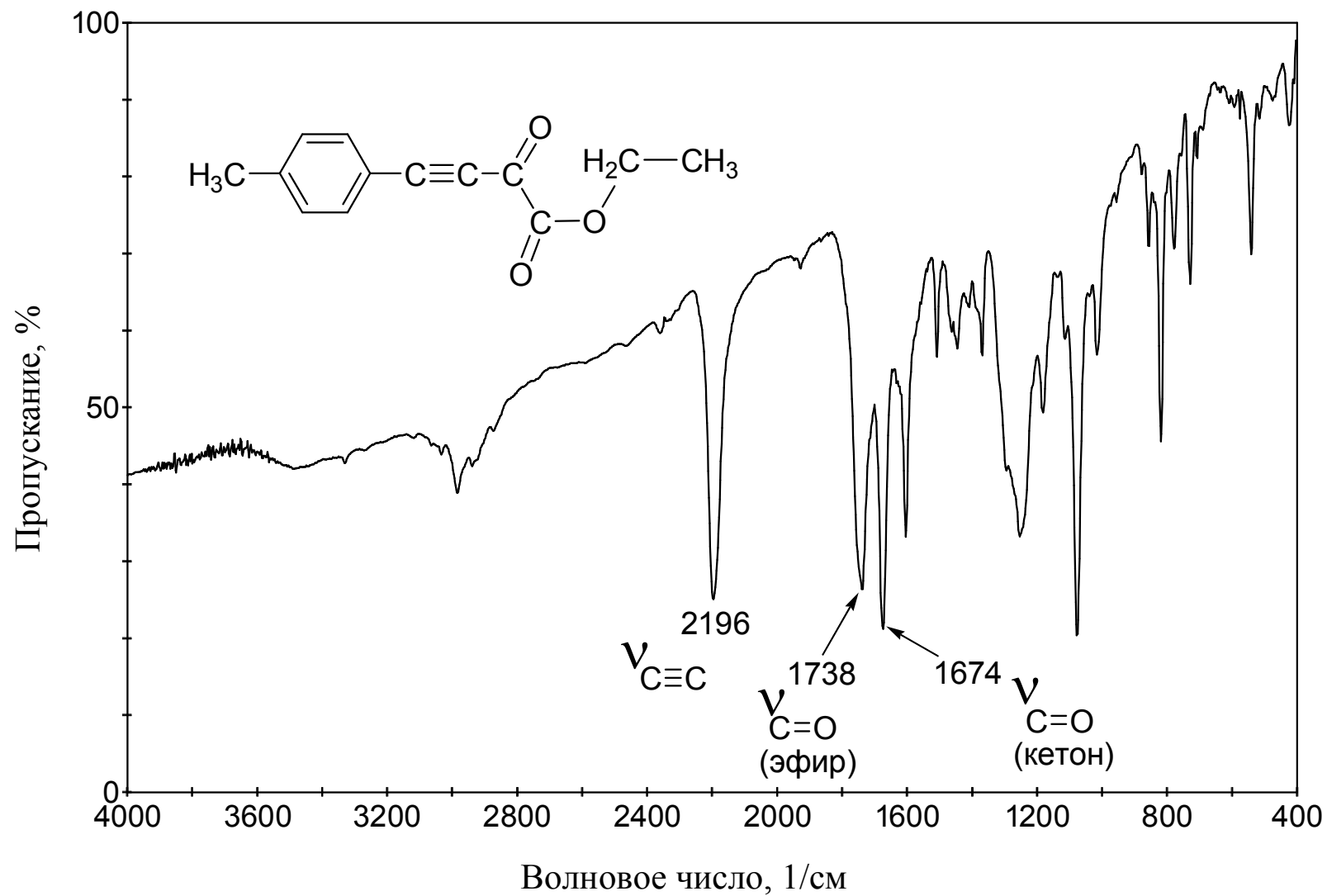
$$\nu_{\text{C=O}} = 1730-1710 \text{ см}^{-1}$$

Эфиры α,β -ненасыщенных кислот



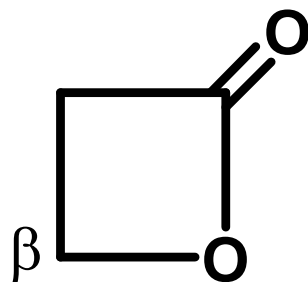
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр сложного эфира



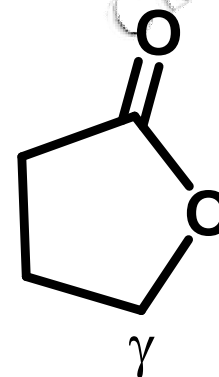
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Лактоны – циклические сложные эфиры



β-лактоны

$$\nu_{\text{C=O}} = 1840 \text{ см}^{-1}$$

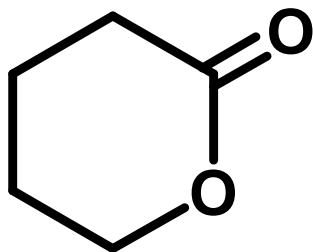


γ-лактоны

$$\nu_{\text{C=O}} = 1770 \text{ см}^{-1}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

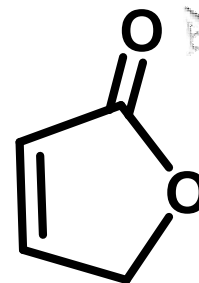
А. В. Васильев
Спектроскопия



δ

δ -лактоны

$$\nu_{\text{C=O}} = 1735 \text{ см}^{-1}$$



непредельные
 γ -лактоны

$$\nu_{\text{C=O}} = 1750 \text{ см}^{-1}$$

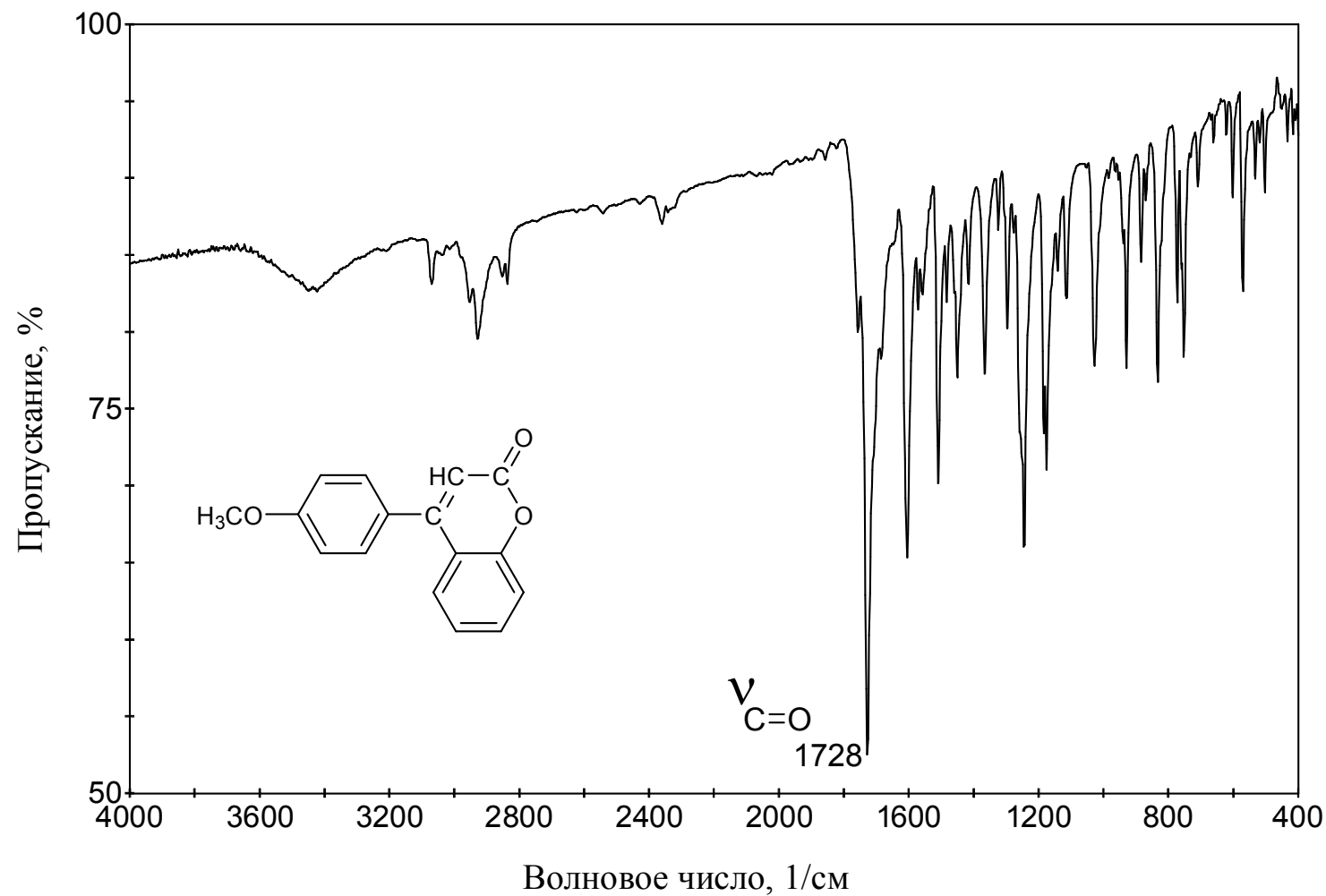
А. В. Васильев
Спектроскопия

А. В. Васильев
Спектроскопия

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

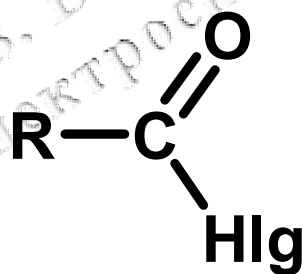
А. В. Васильев
Спектроскопия

ИК-спектр непредельного δ -лактона – 4-(4-метоксифенил)кумарина



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Галогенангидриды



$\text{Hal} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$

$$\nu_{\text{C}=\text{O}} = 1900-1870 \text{ cm}^{-1}$$

фторангидриды

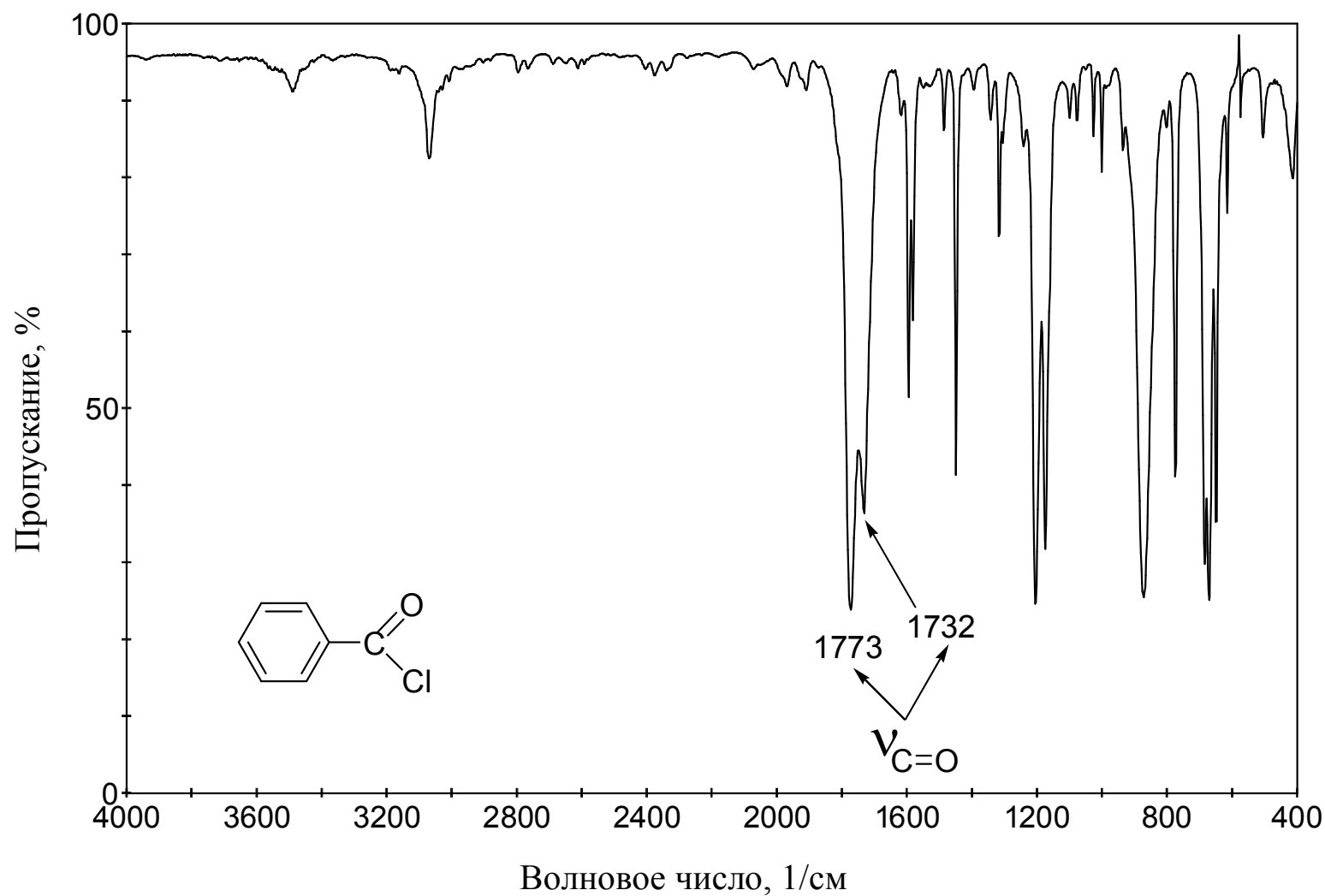
*две полосы высокой
интенсивности*

$$\nu_{\text{C}=\text{O}} = 1815-1730 \text{ cm}^{-1}$$

хлор- и бромангидриды

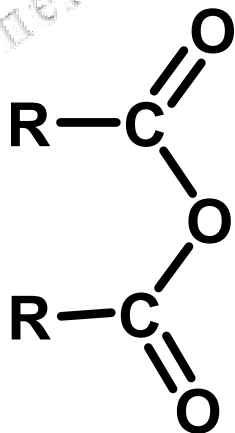
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр бензоилхлорида



Особенности ИК- спектроскопии органических соединений

Ангидриды карбоновых кислот



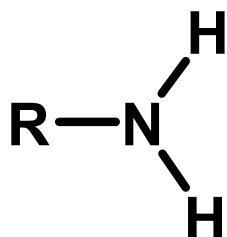
$$\nu_{\text{C=O}} = 1870-1770 \text{ см}^{-1} \text{ симм.}$$
$$1800-1720 \text{ см}^{-1} \text{ асимм.}$$

*полосы высокой
интенсивности*

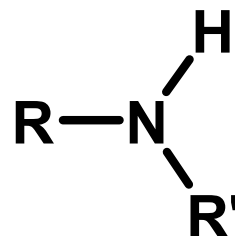
$$\nu_{\text{C-O-C}} = 1040 \text{ см}^{-1}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

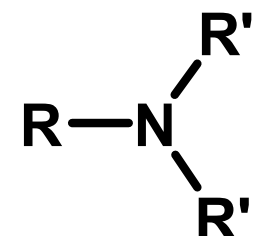
Амины



первичный
амин



вторичный
амин



третичный
амин

Колебания аминогруппы:

$$\nu_{\text{NH}_2} = 3500\text{-}3300 \text{ см}^{-1}$$

первичные

две полосы средней
интенсивности

$$\nu_{\text{N-H}} = 3450\text{-}3200 \text{ см}^{-1}$$

вторичные

одна полоса средней
интенсивности

$$\delta_{\text{N-H}} = 1650\text{-}1550 \text{ см}^{-1}$$

первичные и вторичные

полоса средней
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Валентные колебания связи C-N:

$$\nu_{\text{C-N}} = 1220-1020 \text{ см}^{-1}$$

алкиламины

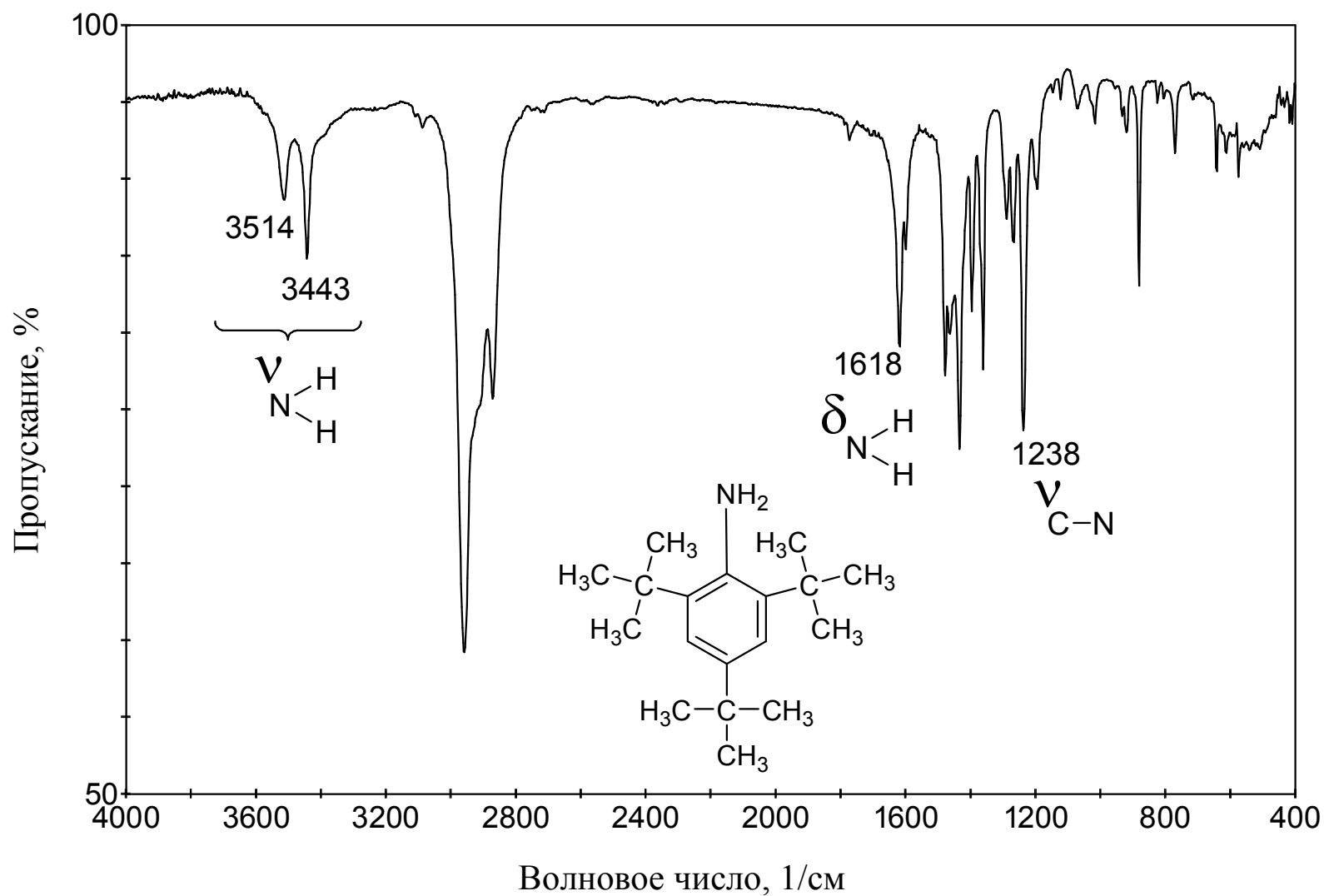
*полосы средней
интенсивности*

$$\nu_{\text{C-N}} = 1360-1220 \text{ см}^{-1}$$

ариламины

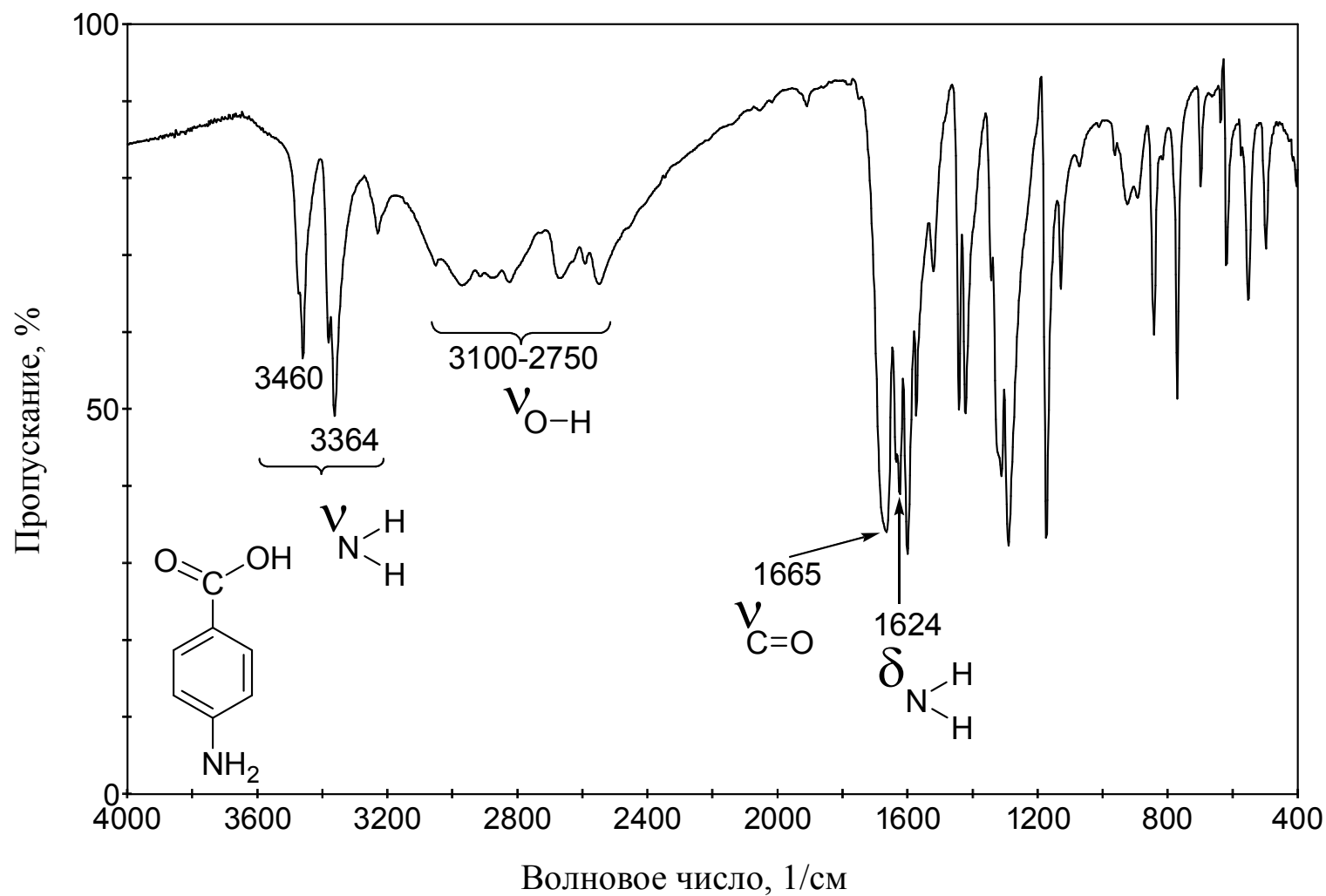
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр ароматического первичного амина



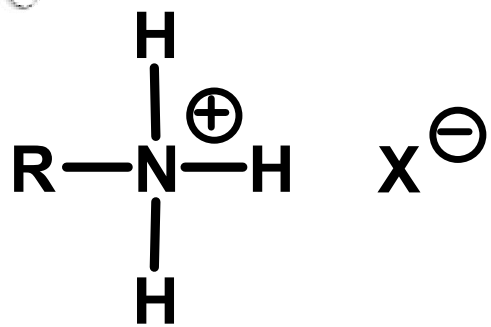
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр п-аминобензойной кислоты



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Соли аминов

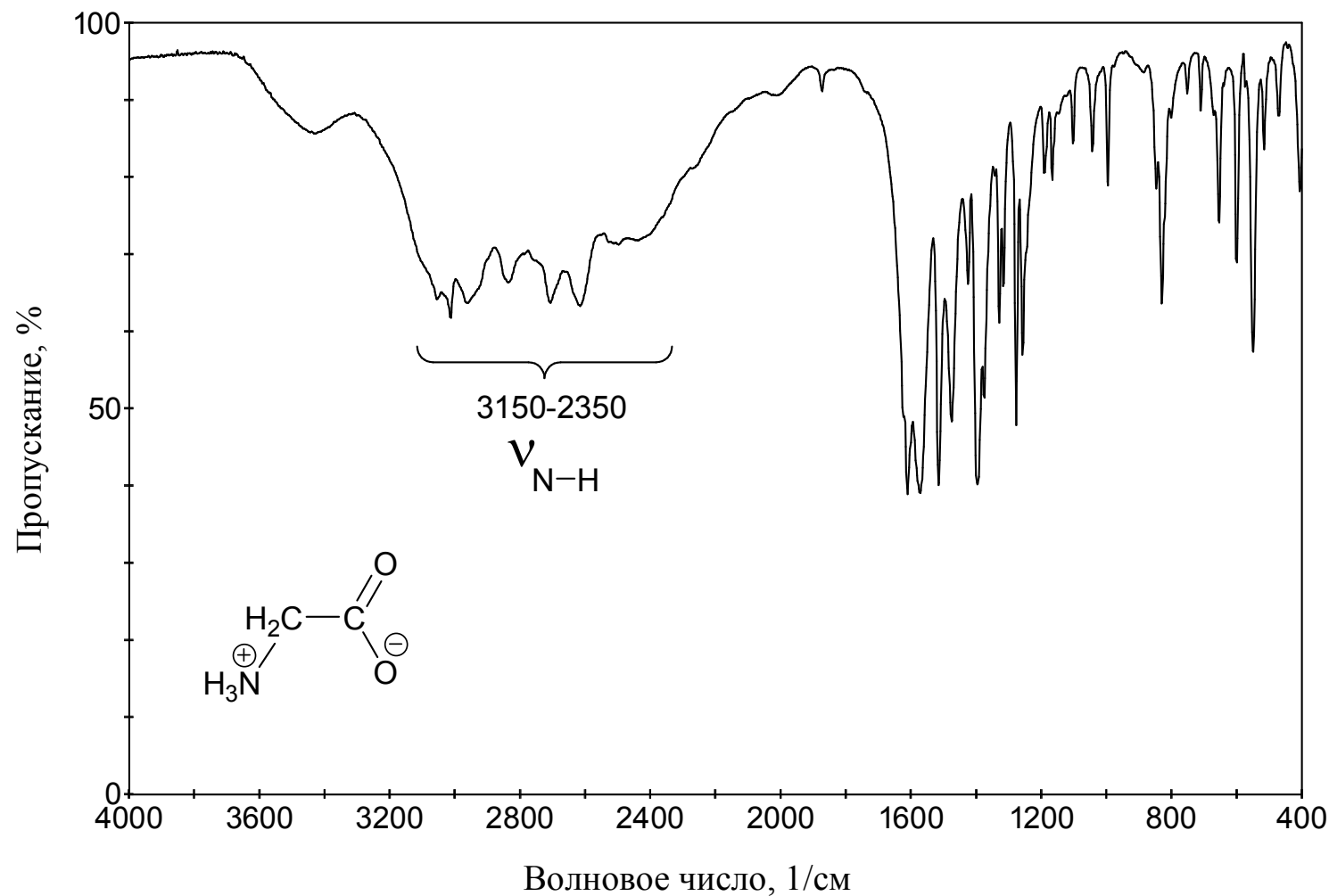


$$\nu_{\text{N}^+-\text{H}} = 3000-2600 \text{ cm}^{-1}$$

$$\delta_{\text{N}^+-\text{H}} = 1600-1460 \text{ cm}^{-1}$$

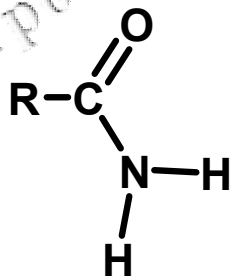
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр цвиттерионной формы аминокислоты глицина

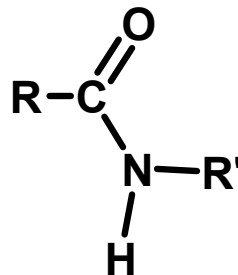


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

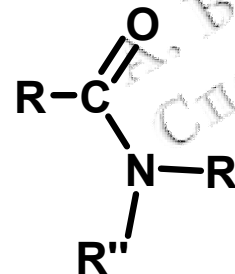
Амиды



первичный
амид



вторичный
амид



третичный
амид

Валентные колебания группы NH₂ амидов:

$$\nu_{\text{NH}_2} = 3500-3100 \text{ см}^{-1}$$

первичные амиды

две полосы средней
интенсивности

$$\nu_{\text{N-H}} = 3460-3070 \text{ см}^{-1}$$

вторичные амиды

одна полосы средней
интенсивности

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Валентные колебания группы C=O амидов (полоса амид-I):

первичные $\nu_{\text{C=O}} = 1690\text{-}1650 \text{ см}^{-1}$

вторичные $\nu_{\text{C=O}} = 1685\text{-}1660 \text{ см}^{-1}$

третичные $\nu_{\text{C=O}} = 1650 \text{ см}^{-1}$

*полосы высокой
интенсивности*

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Деформационные колебания связей N-H амидов:

$$\delta_{\text{N-H}} = 1630-1510 \text{ см}^{-1} \quad (\text{полоса амид-II})$$

плоскостное

*полосы высокой
интенсивности*

$$\delta_{\text{N-H}} = 700 \text{ см}^{-1}$$

внеплоскостное

*полосы средней
интенсивности*

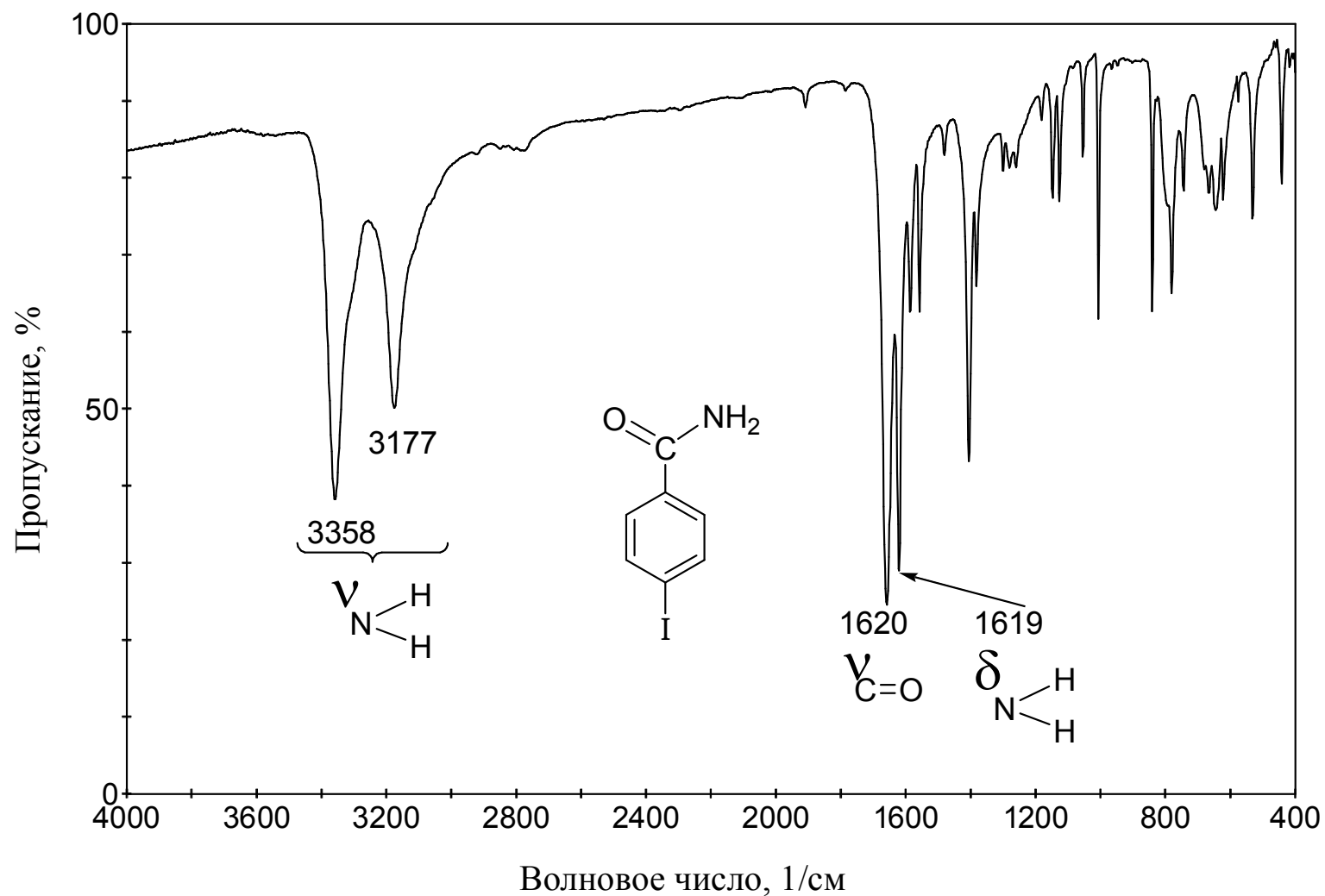
Валентные колебания связей C-N амидов:

$$\nu_{\text{C-N}} = 1400 \text{ см}^{-1}$$

*полосы средней
интенсивности*

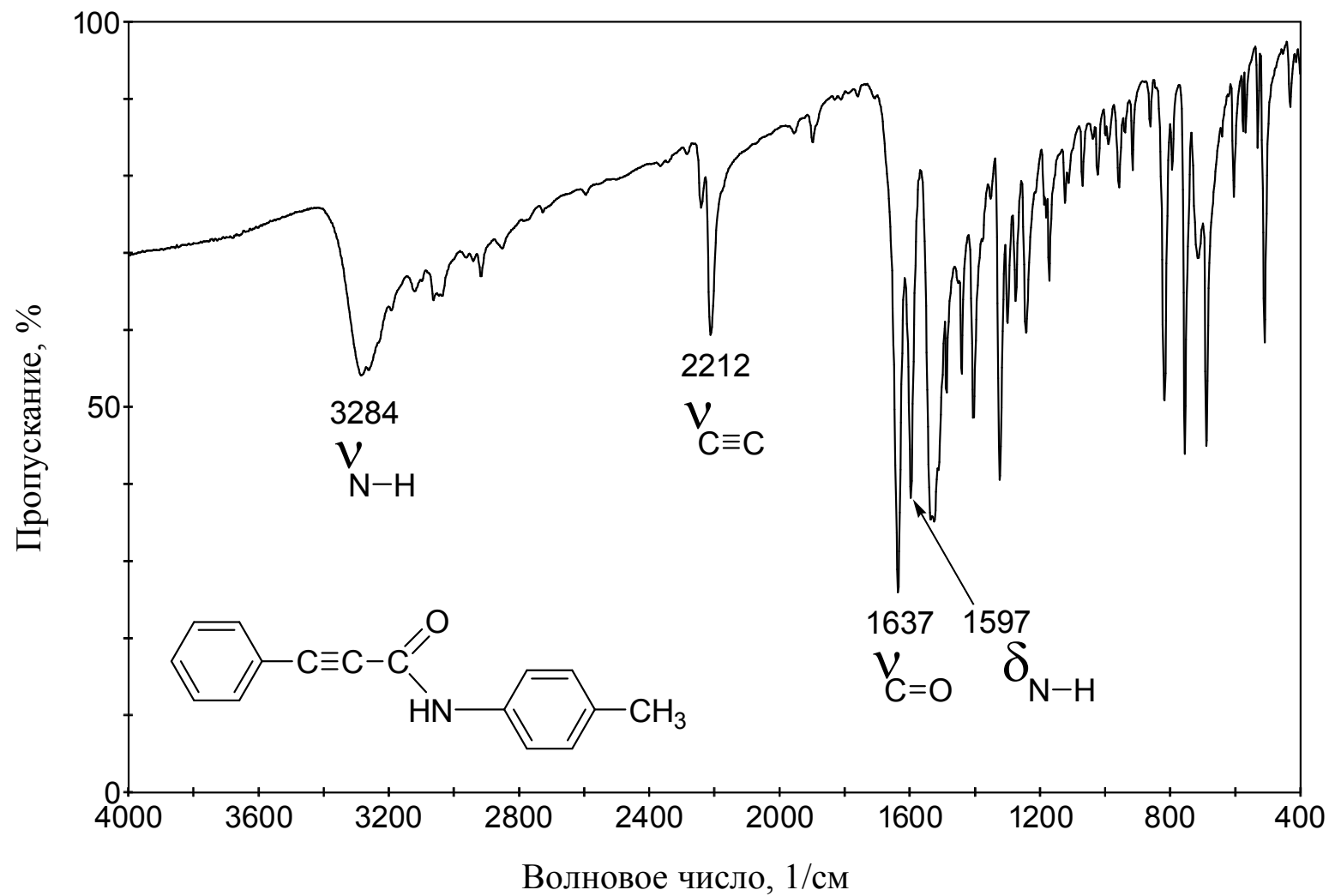
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр первичного амида п-йодбензойной кислоты



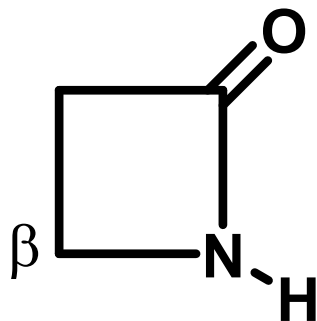
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр вторичного амида

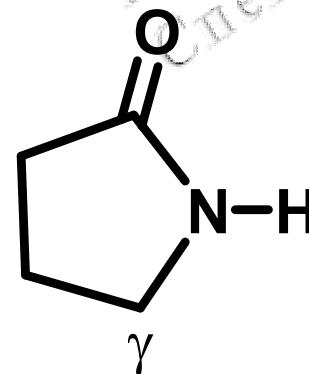


Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Лактамы – циклические амиды



β-лактамь



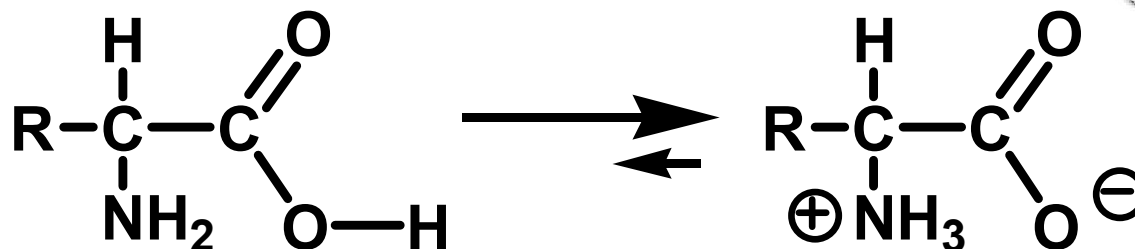
γ-лактамь

$$\nu_{\text{C=O}} = 1750 \text{ см}^{-1}$$

$$\nu_{\text{C=O}} = 1700 \text{ см}^{-1}$$

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Аминокислоты



α -аминокислота,
нейтральная
форма

цвиттерионная
форма с разделёнными
зарядами

$$\nu_{\text{NH}_3^+} = 3130-2000 \text{ см}^{-1}$$

*широкая полоса
высокой интенсивности*

$$\delta_{\text{NH}_3^+} = 1660-1600 \text{ см}^{-1} \text{ асимм.}$$
$$1550-1480 \text{ см}^{-1} \text{ симм.}$$

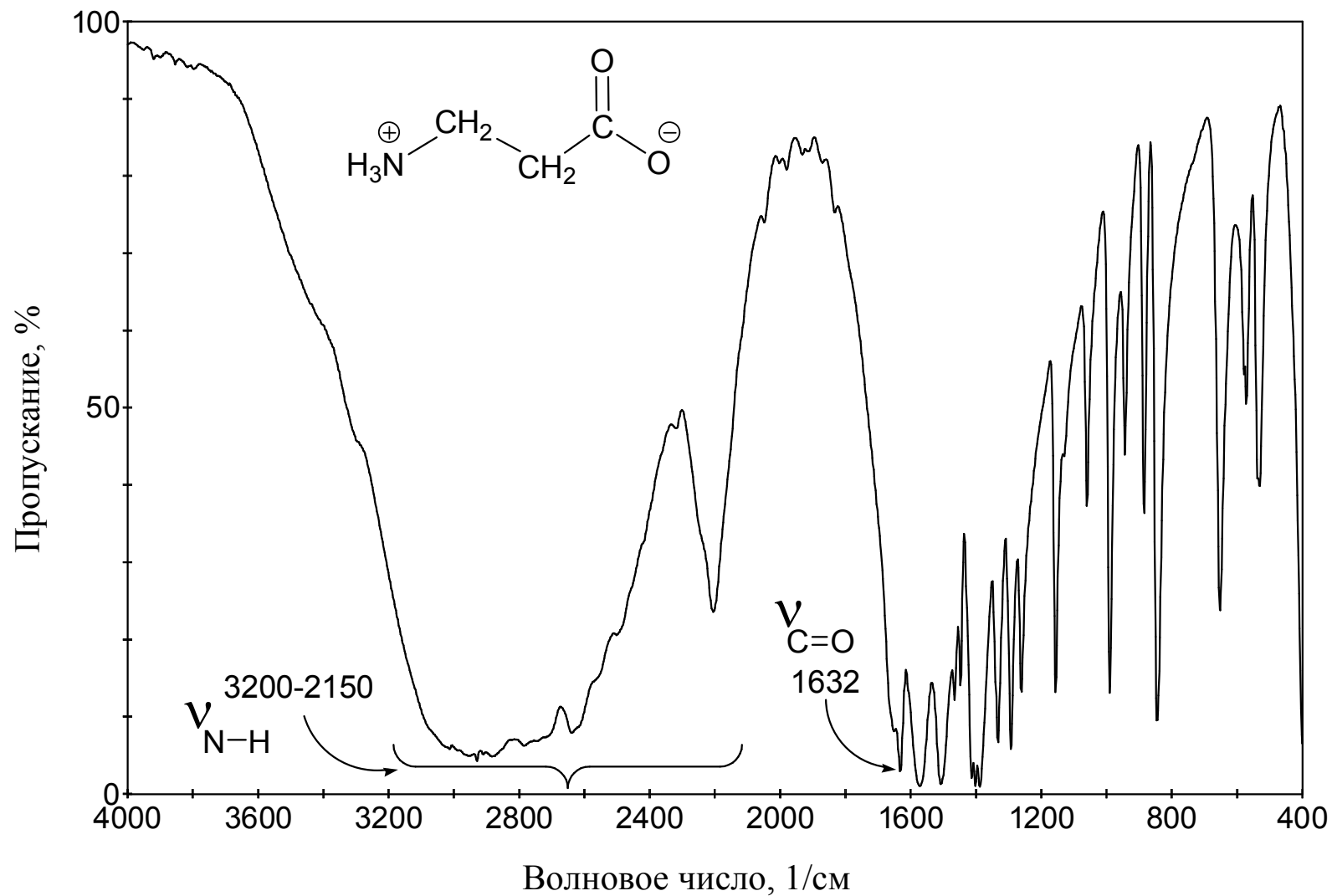
*полосы высокой
интенсивности*

$$\nu_{\text{C=O}} = 1650-1560 \text{ см}^{-1}$$

*полоса высокой
интенсивности*

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр цвиттерионной формы β -аминопропионовой кислоты



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

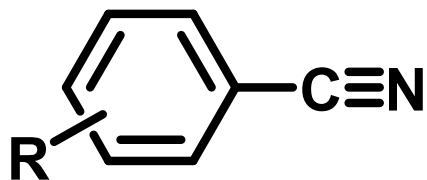
Нитрилы (цианиды)



алкилнитрилы

$$\nu_{\text{C}\equiv\text{N}} = 2260-2240 \text{ см}^{-1}$$

*полосы высокой
интенсивности*

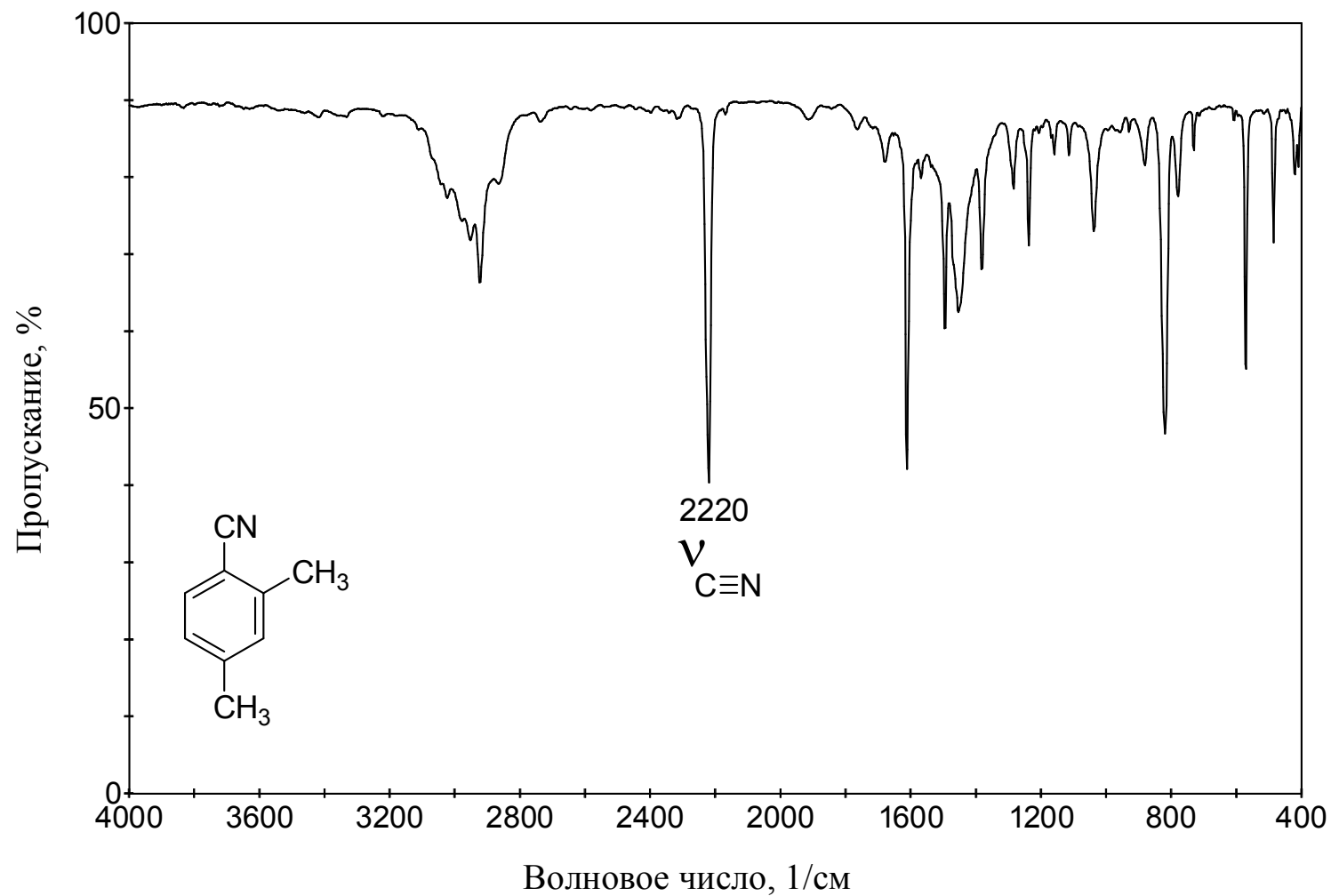


арилнитрилы

$$\nu_{\text{C}\equiv\text{N}} = 2240-2220 \text{ см}^{-1}$$

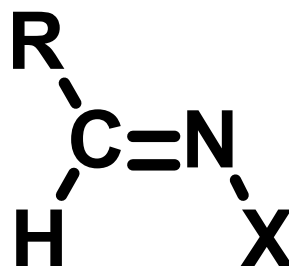
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр ароматического нитрила



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Азометины

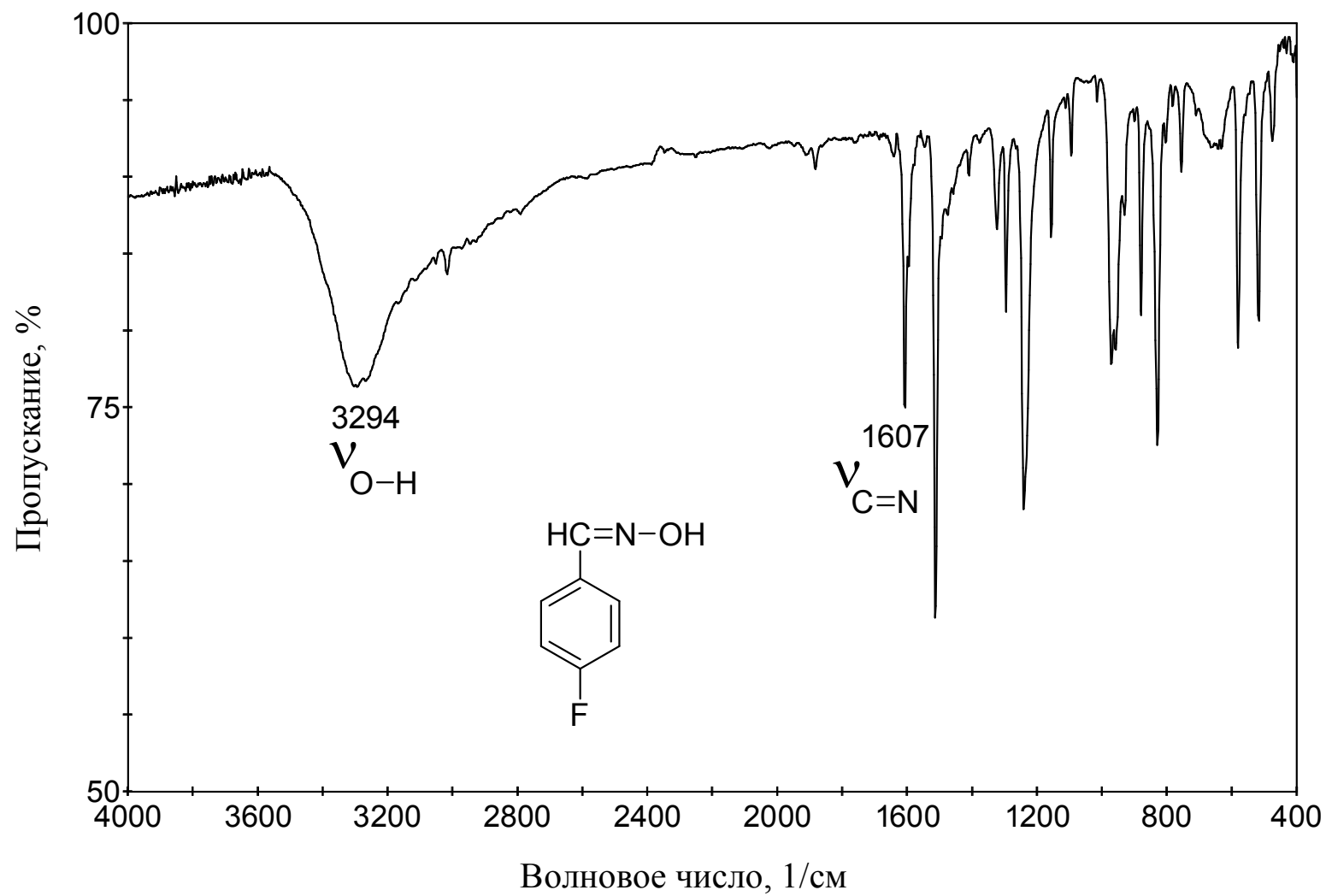


$$\nu_{\text{C}=\text{N}} = 1690\text{-}1605 \text{ cm}^{-1}$$

*полоса высокой
интенсивности*

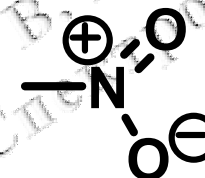
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр оксима



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

А. В. Васильев
Спектроскопия

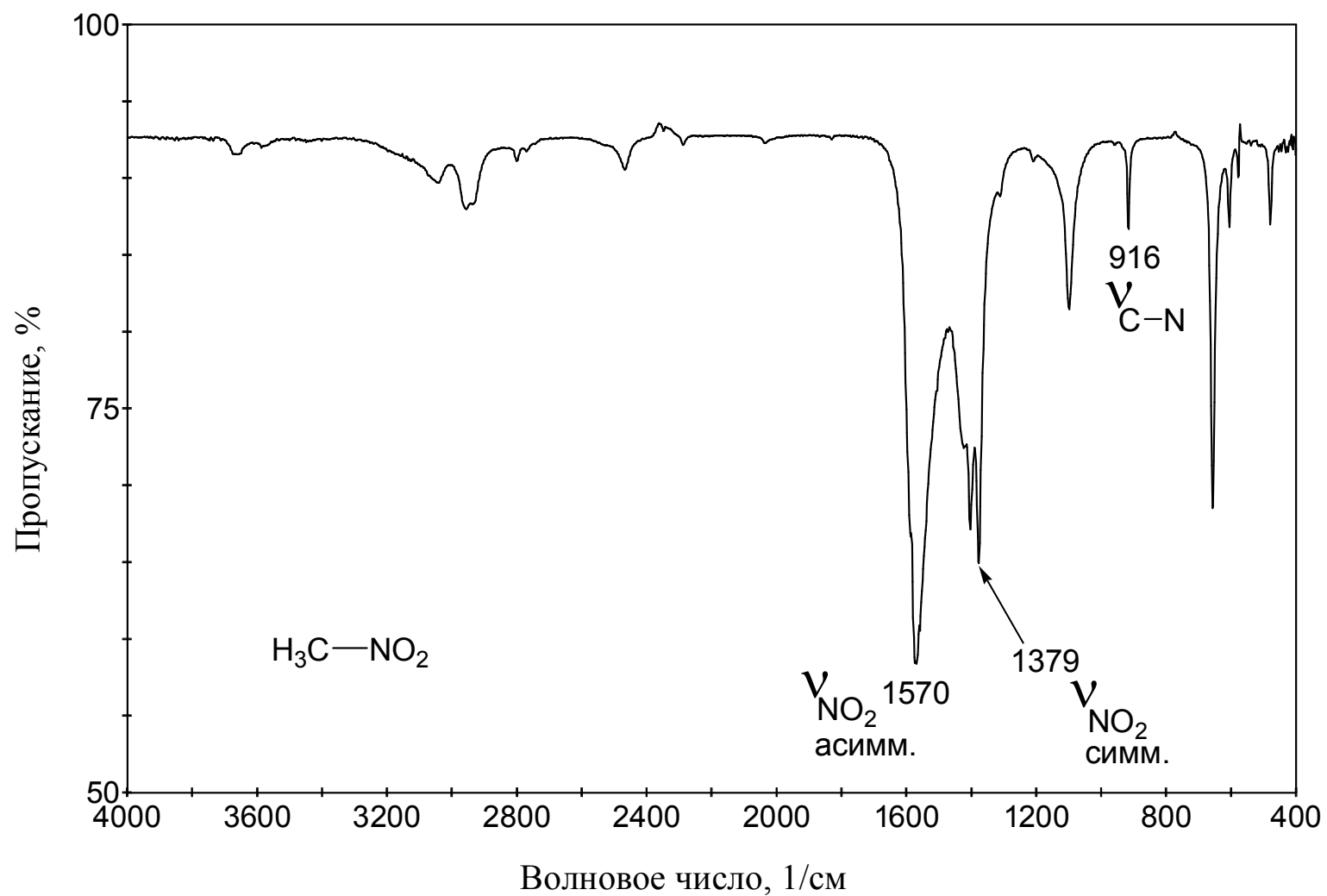
$$\text{—N}^{\oplus}(\text{O}^{\ominus})_2$$


$\nu_{\text{C-N}} = 920$

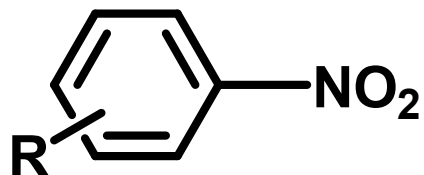
Этот

Особенности ИК- спектроскопии органических соединений

ИК-спектр нитрометана



Особенности ИК- спектроскопии органических соединений



арилнитросоединения

$$\nu_{\text{NO}_2} = 1550-1510 \text{ см}^{-1} \text{ асимм.}$$
$$1365-1335 \text{ см}^{-1} \text{ симм.}$$

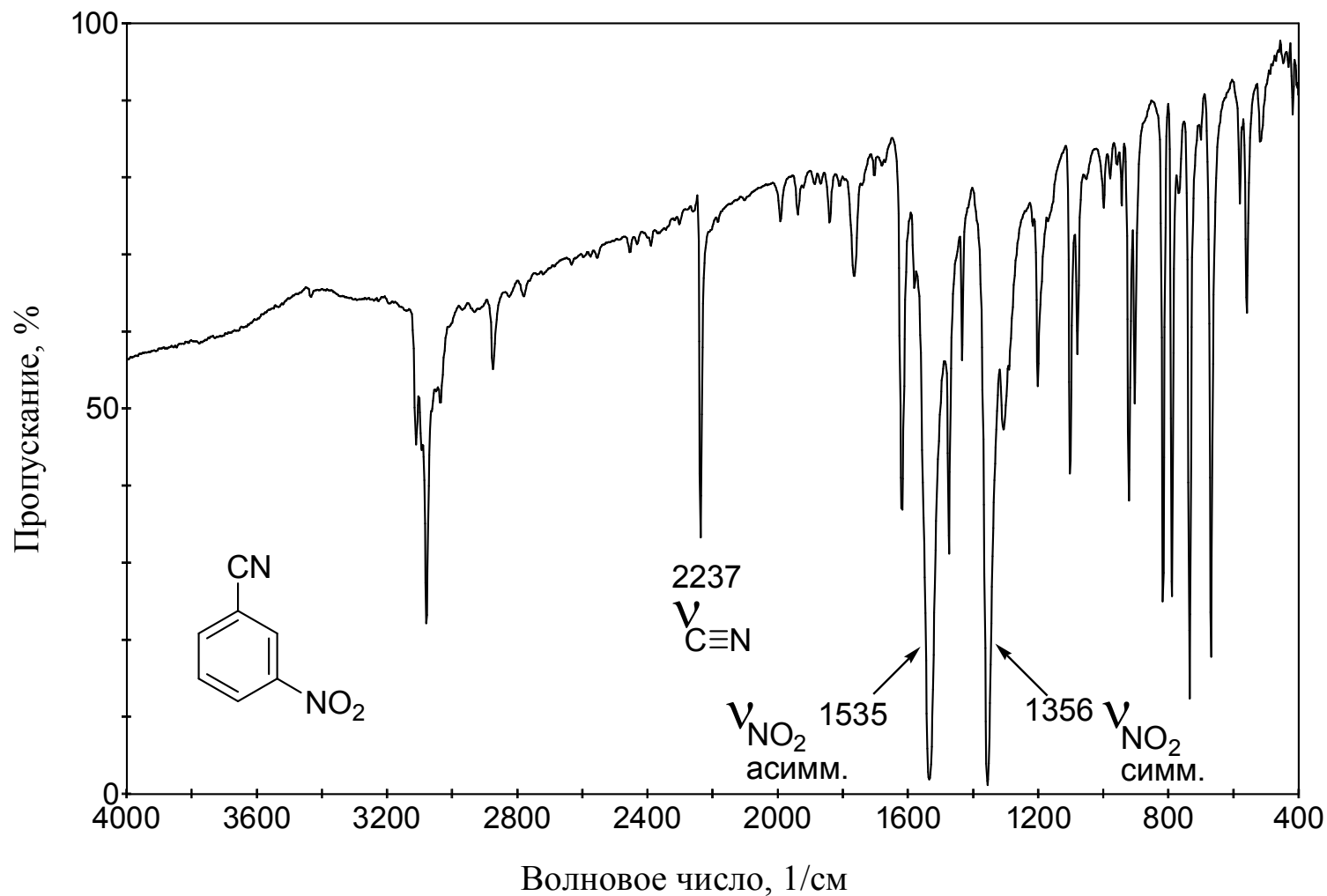
*полосы высокой
интенсивности*

$$\nu_{\text{C-N}} = 860-840 \text{ см}^{-1}$$

*полосы высокой
интенсивности*

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

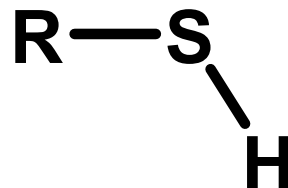
ИК-спектр *мета*-нитробензонитрила



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Серосодержащие соединения

Тиолы



$$\nu_{\text{S-H}} = 2600-2540 \text{ см}^{-1}$$

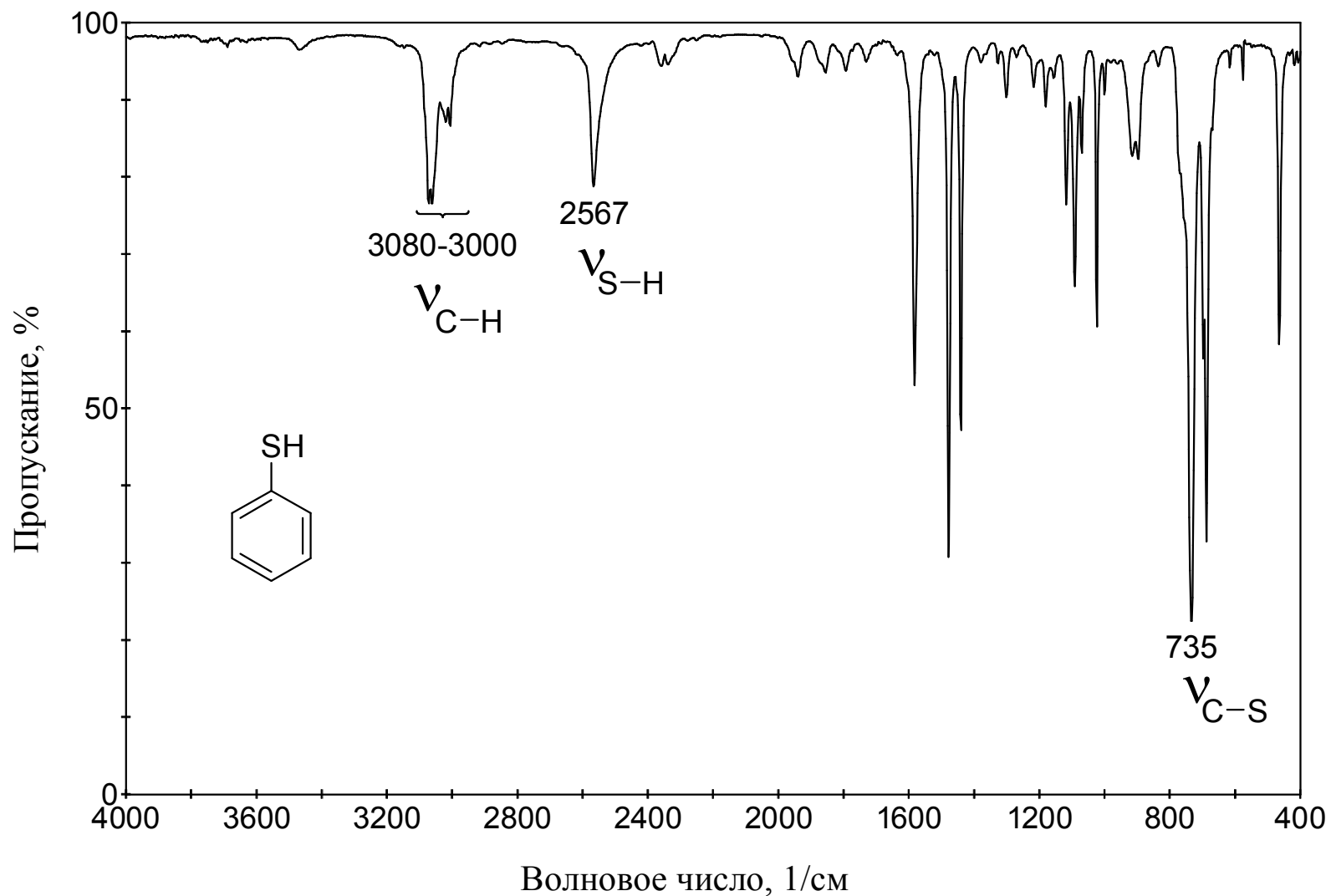
полосы средней
интенсивности

$$\nu_{\text{C-S}} = 740-570 \text{ см}^{-1}$$

полосы средней
интенсивности

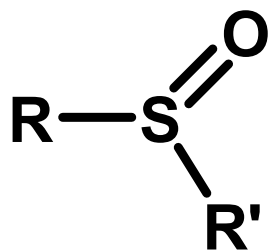
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр тиофенола



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Сульфоксиды

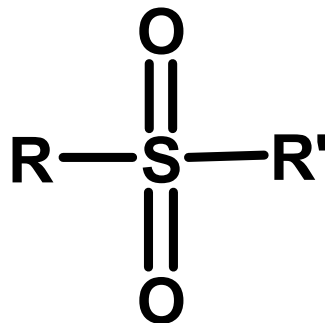


$$\nu_{\text{S}=\text{O}} = 1220-980 \text{ cm}^{-1}$$

*полосы средней
интенсивности*

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Сульфоны

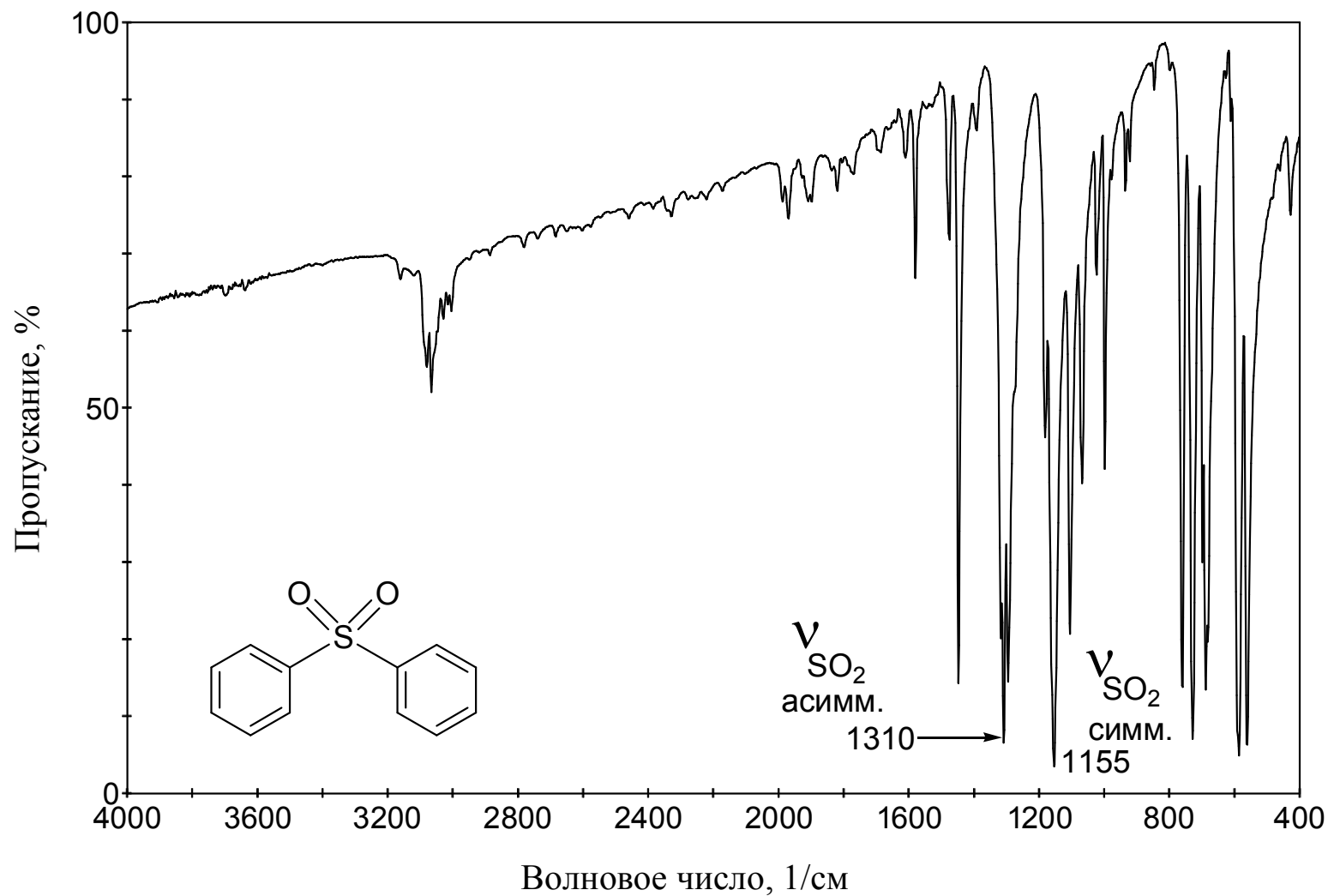


$\nu_{\text{SO}_2} = 1350\text{-}1300 \text{ cm}^{-1}$ асимм.
 $1160\text{-}1140 \text{ cm}^{-1}$ симм.

полосы высокой
интенсивности

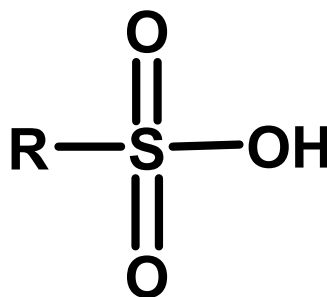
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр дифенилсульфона



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Сульфокислоты

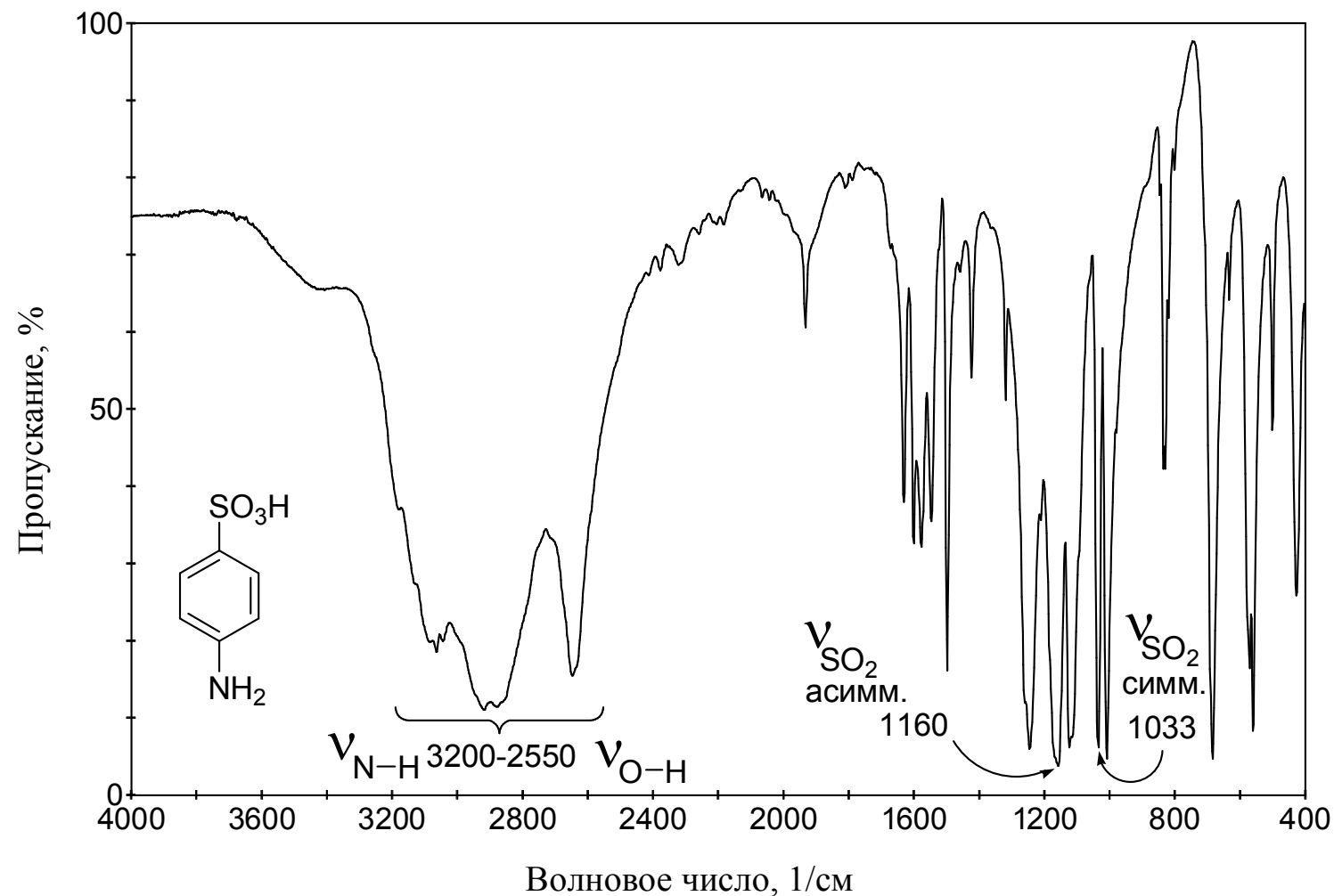


$\nu_{\text{SO}_2} = 1210\text{-}1150 \text{ см}^{-1}$ асимм.
 $1060\text{-}1030 \text{ см}^{-1}$ симм.

полосы высокой
интенсивности

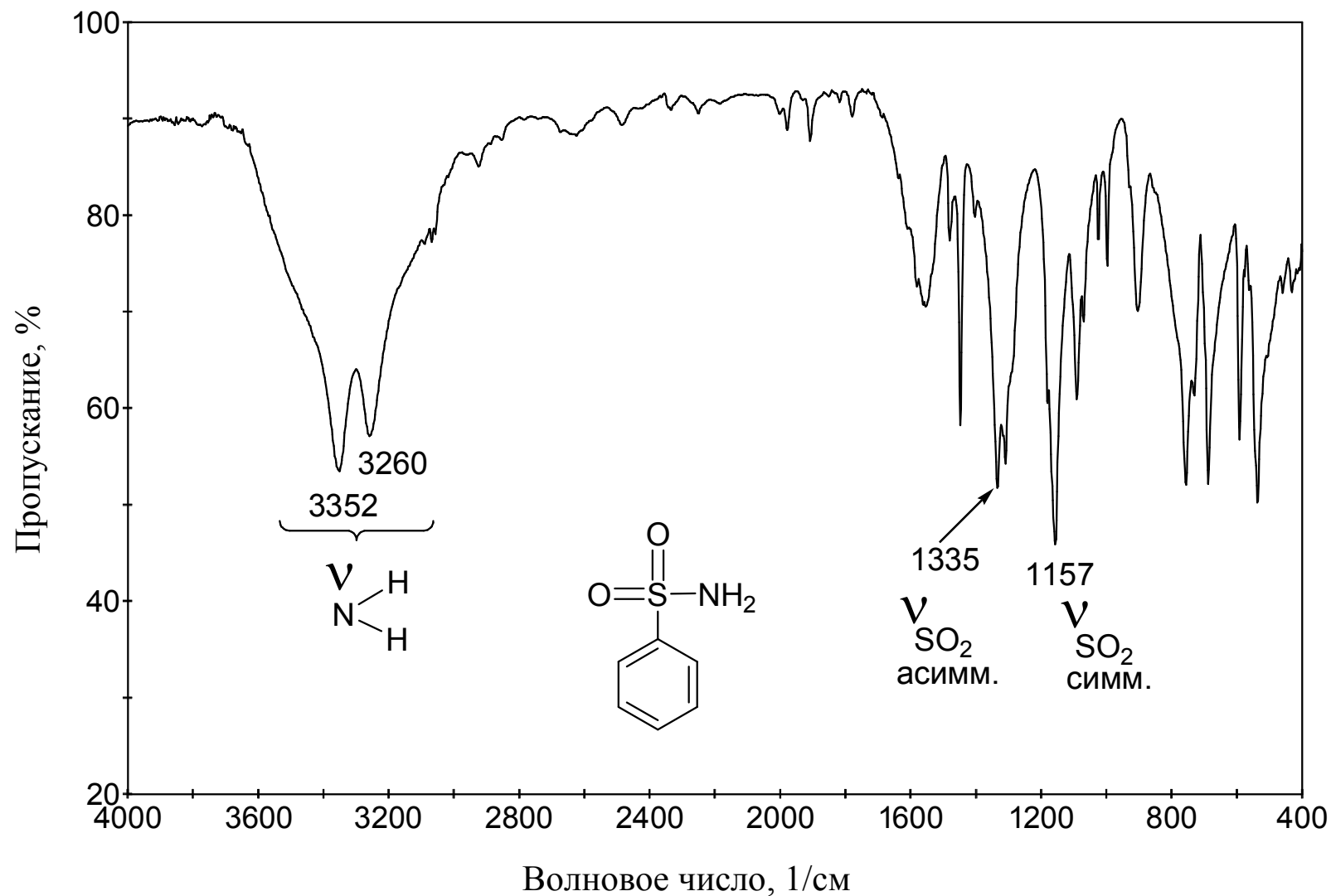
Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр *пара*-аминобензолсульфокислоты



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

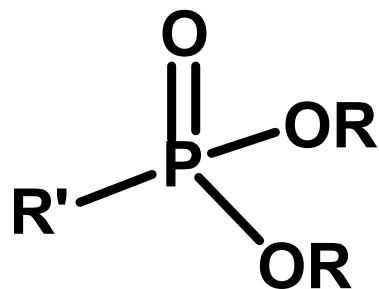
ИК-спектр амида бензолсульфокислоты



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

Фосфорсодержащие соединения

Фосфонаты



$$\nu_{\text{P=O}} = 1280-1240 \text{ см}^{-1}$$

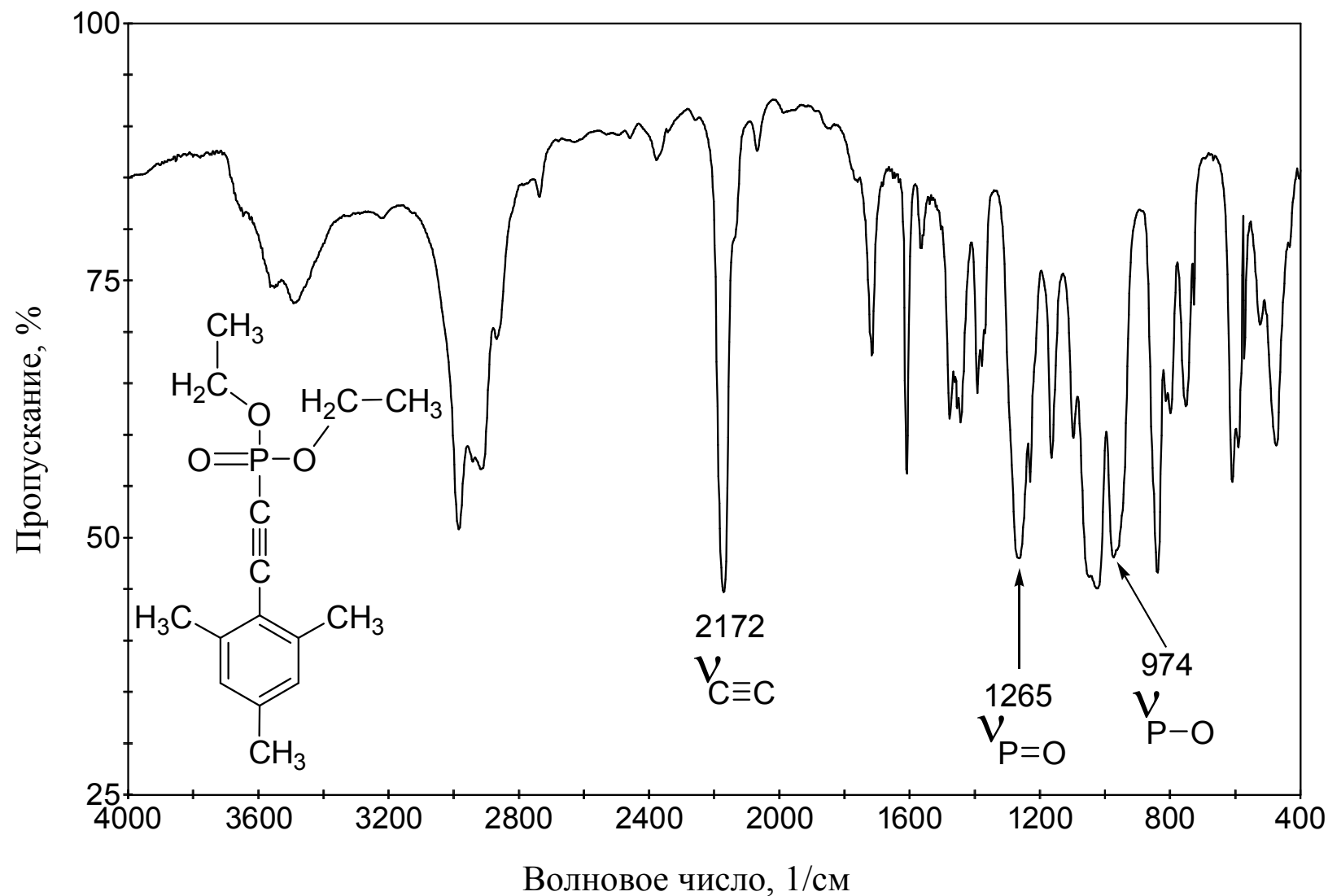
*полосы высокой
интенсивности*

$$\nu_{\text{P-O}} = 1050-970 \text{ см}^{-1}$$

*полосы высокой
интенсивности*

Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектр ацетиленового фосфоната



Особенности ИК-спектроскопии органических соединений

ИК-спектры природных соединений

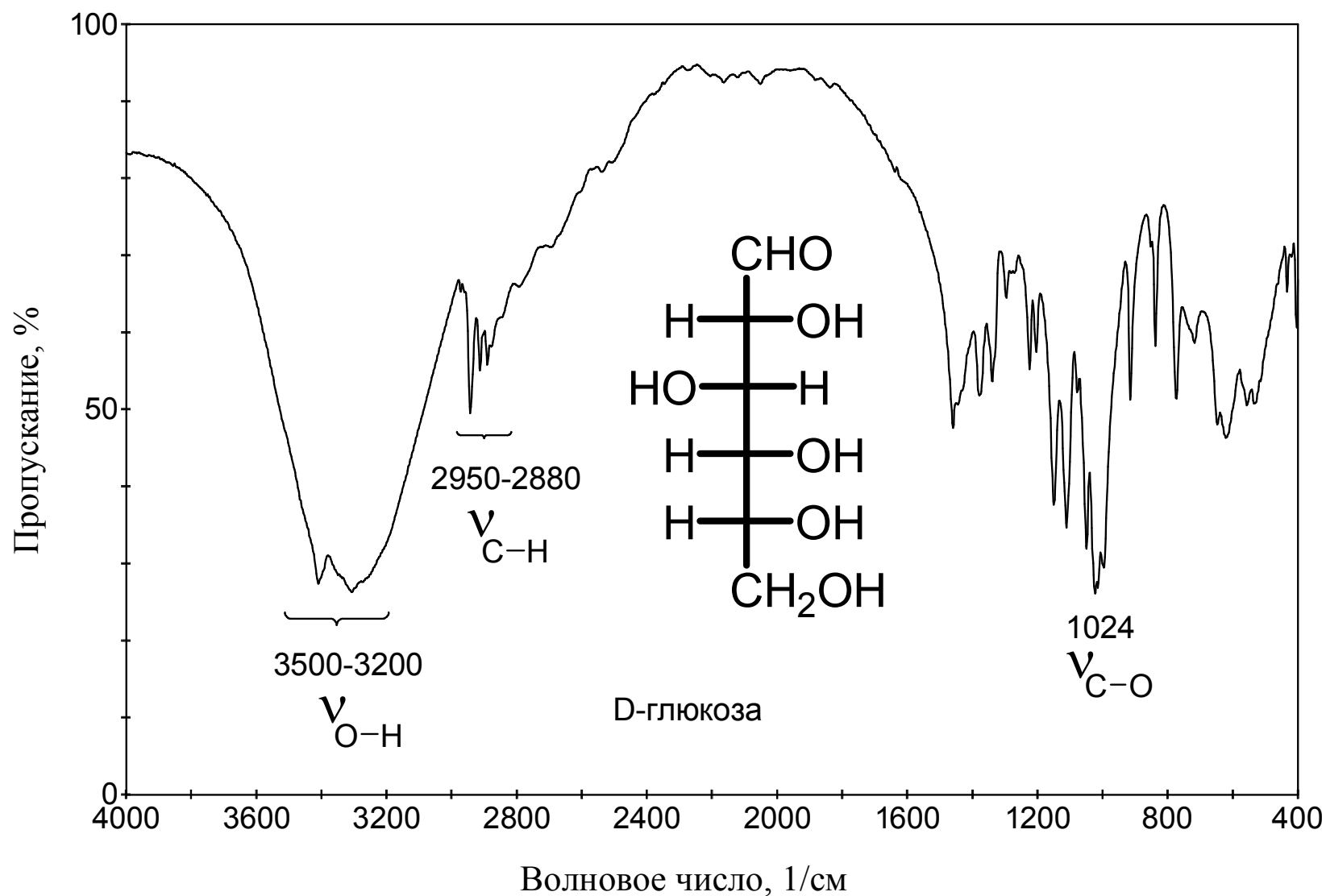
1. Углеводы.

2. Лигнины.

3. Экстрактивные вещества древесины.

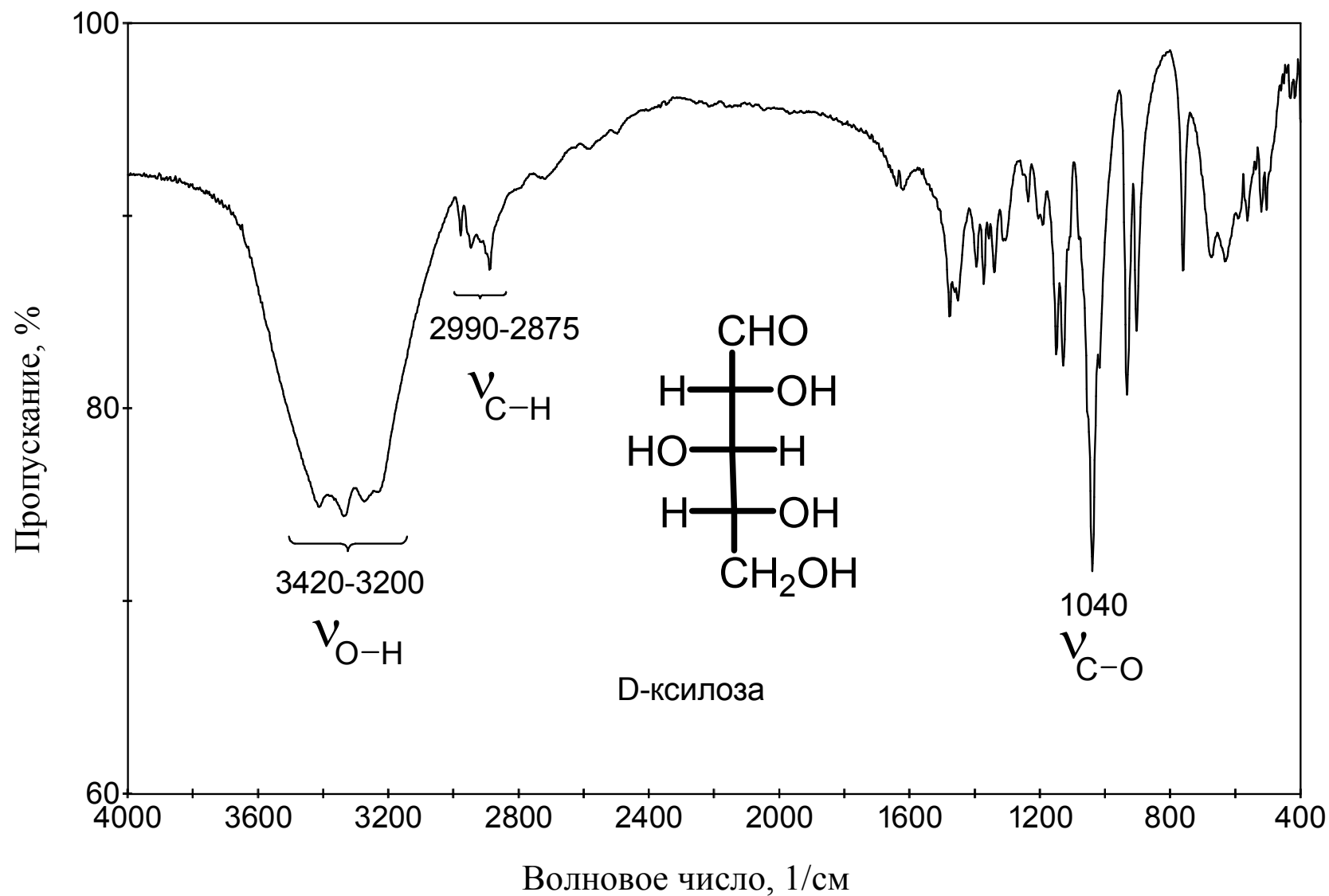
Особенности ИК-спектроскопии природных соединений

ИК-спектр D-глюкозы



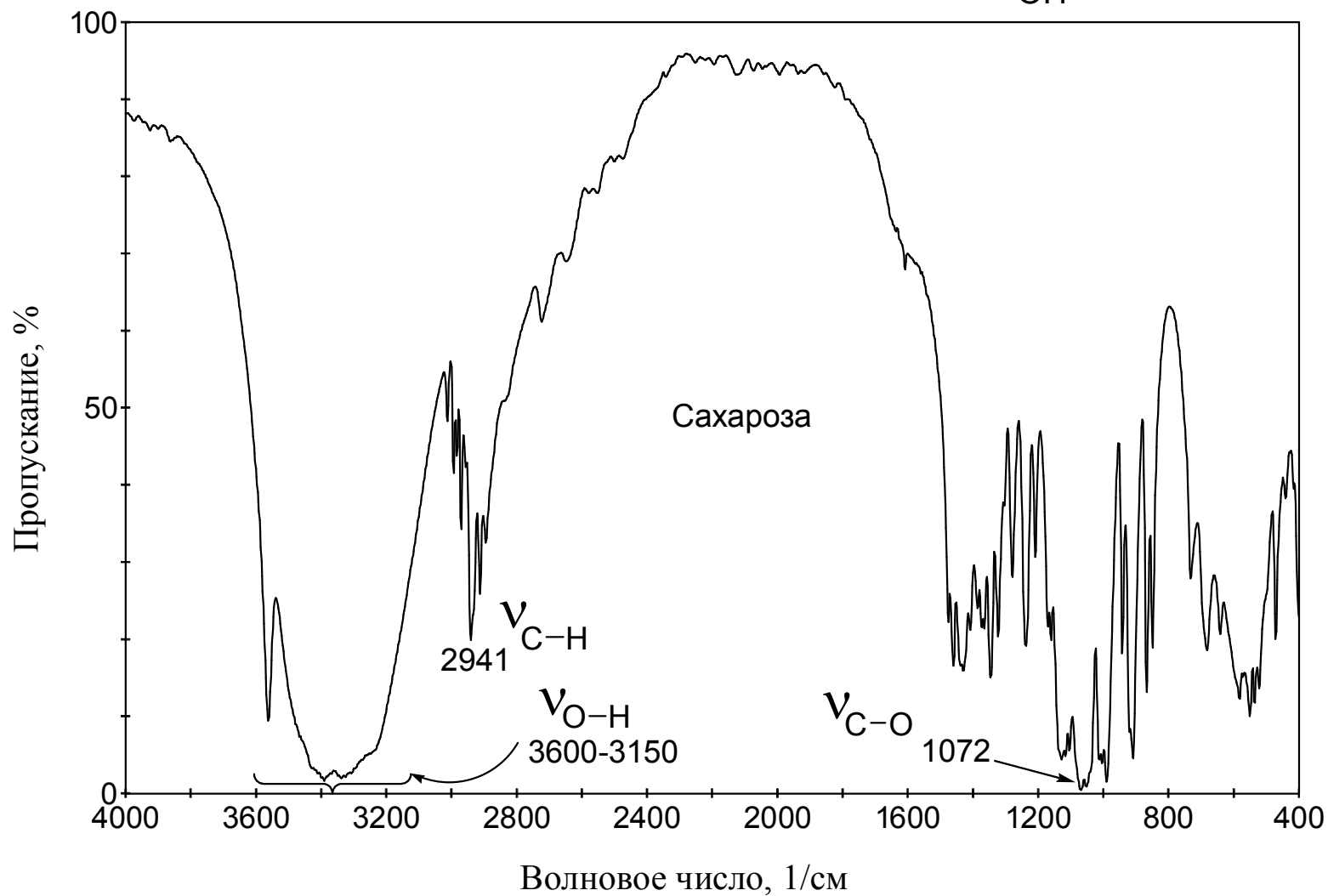
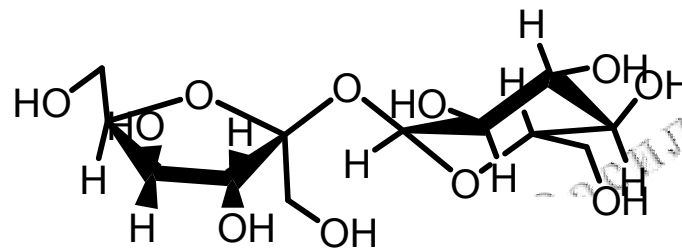
Особенности ИК-спектроскопии природных соединений

ИК-спектр D-ксилозы



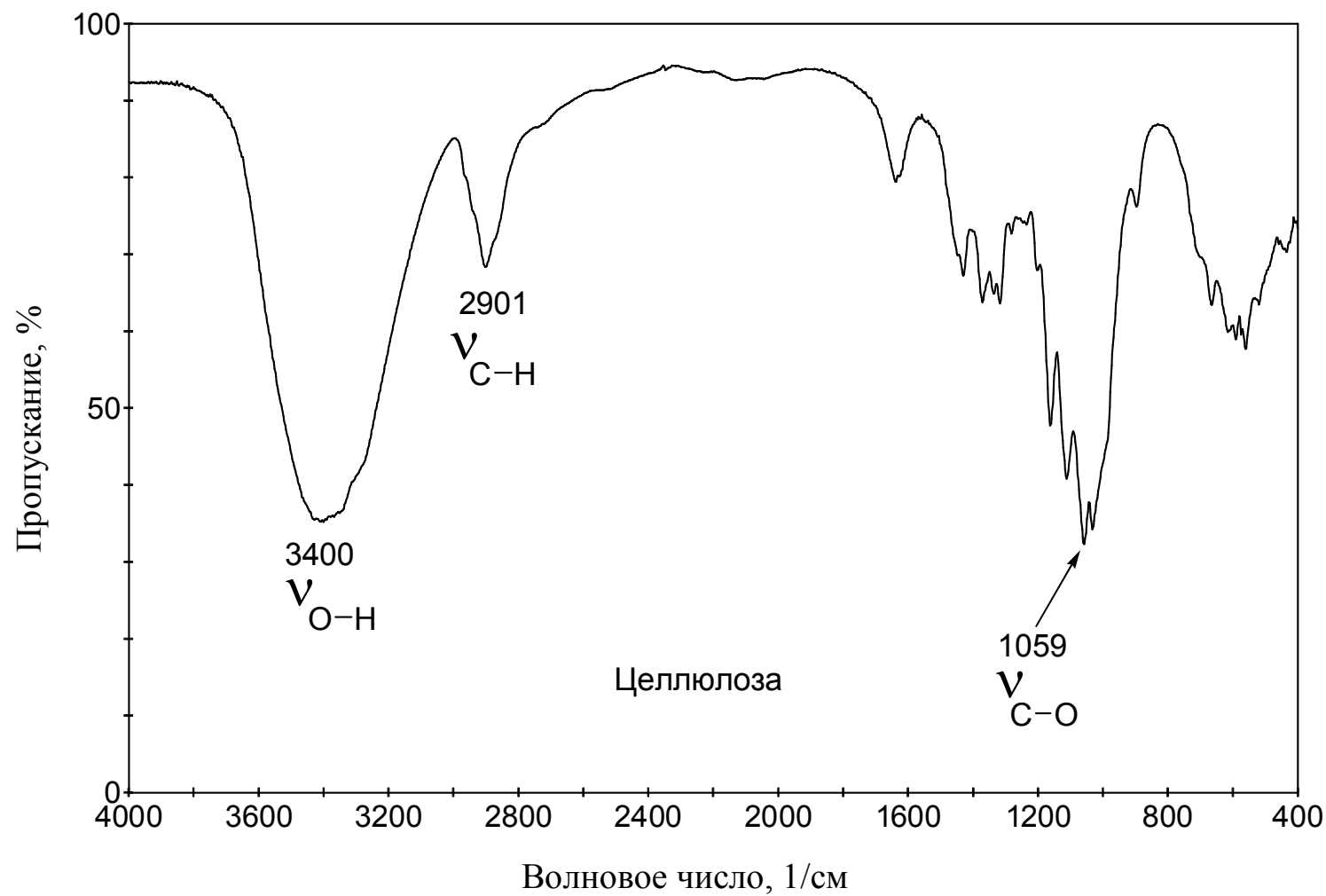
Особенности ИК-спектроскопии природных соединений

ИК-спектр сахарозы



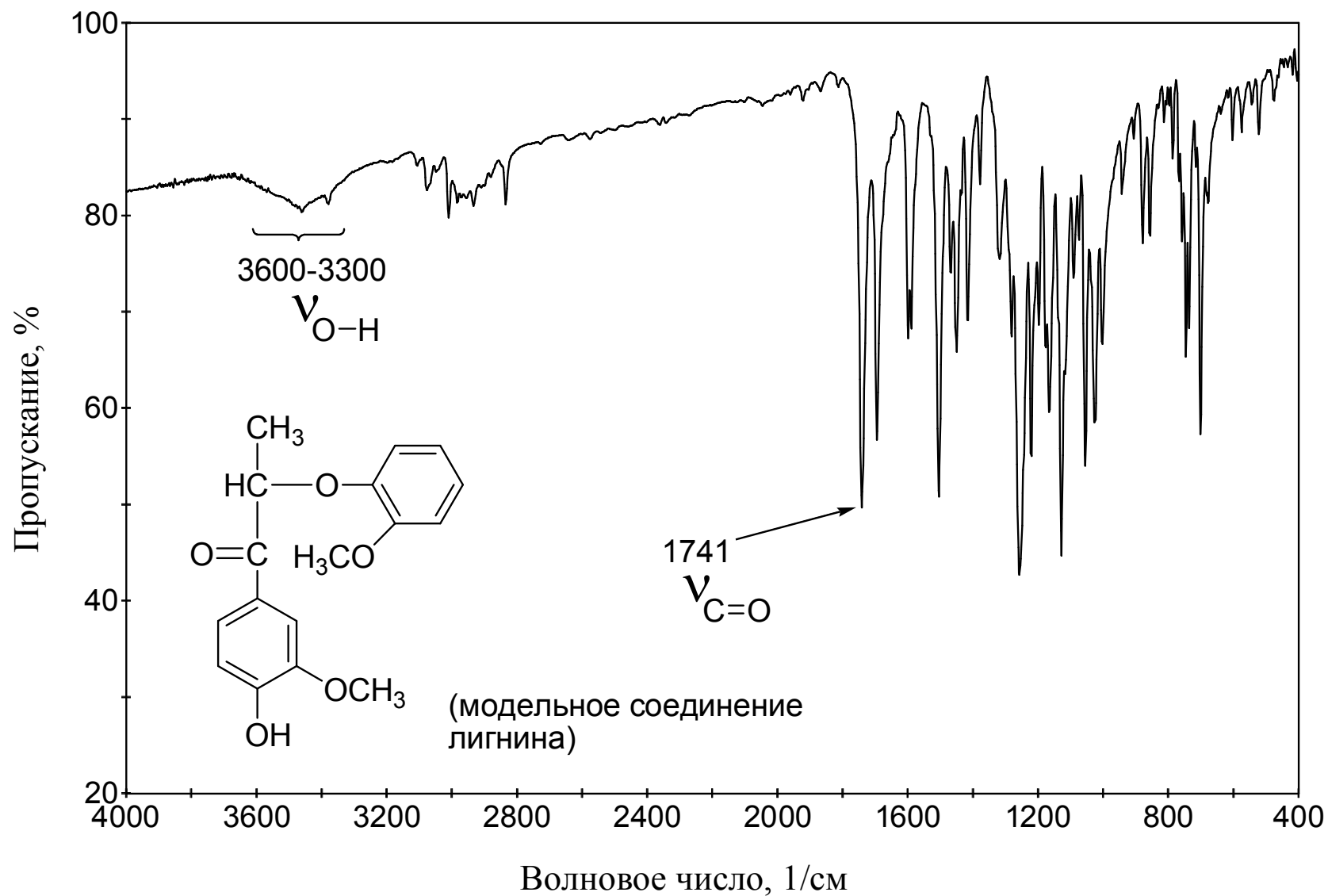
Особенности ИК- спектроскопии природных соединений

ИК-спектр целлюлозы



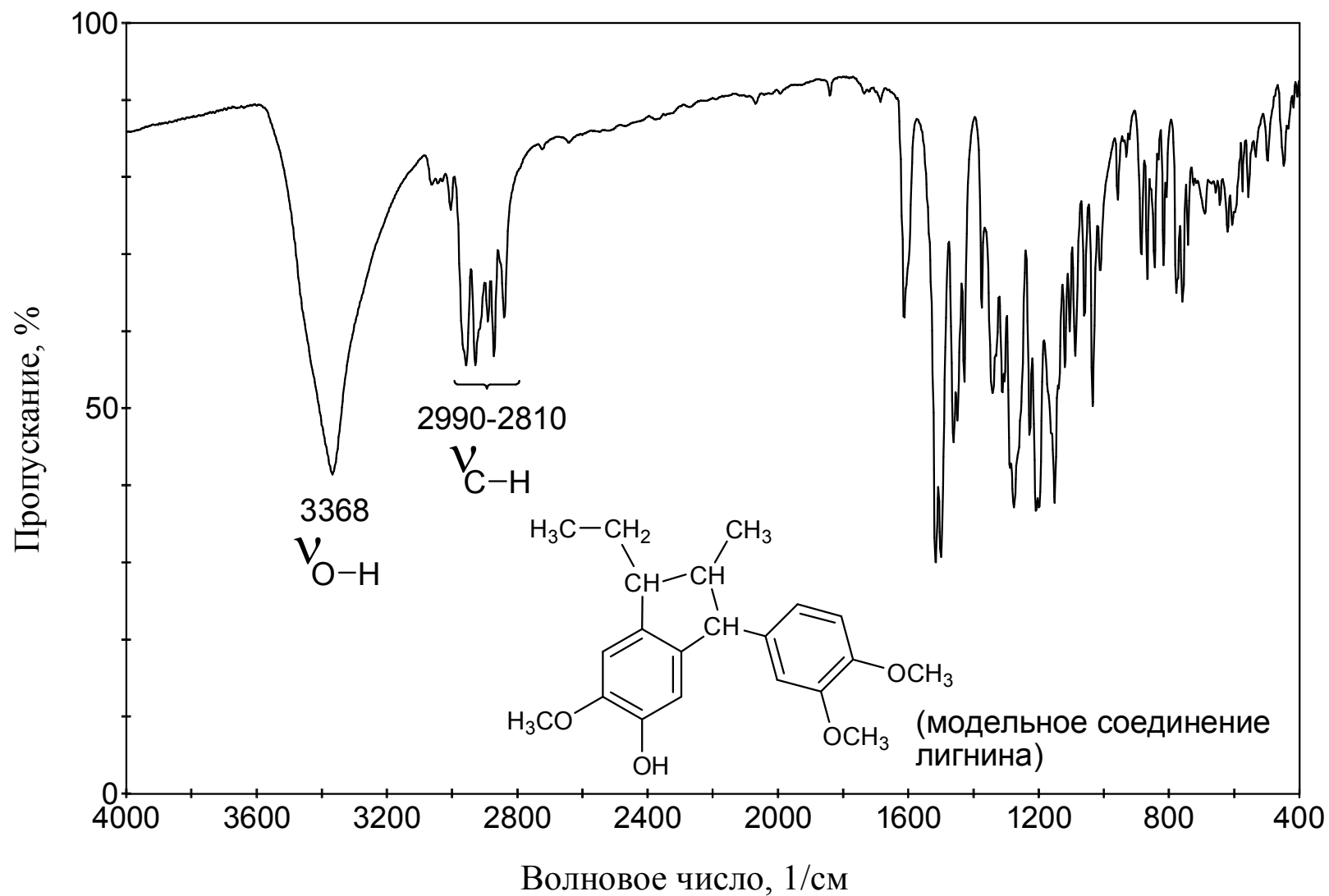
Особенности ИК- спектроскопии природных соединений

ИК-спектр модельного соединения лигнина



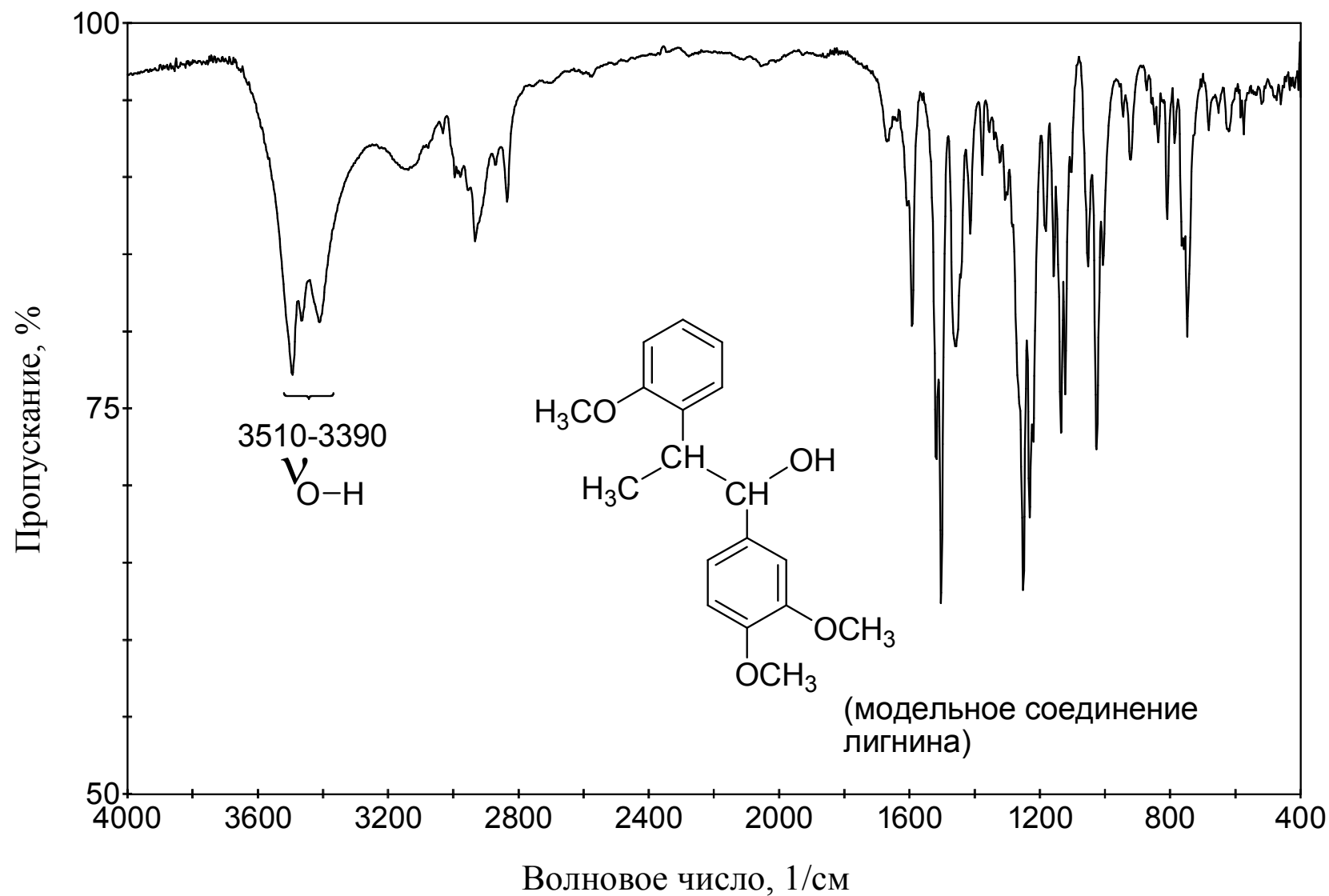
Особенности ИК-спектроскопии природных соединений

ИК-спектр модельного соединения лигнина



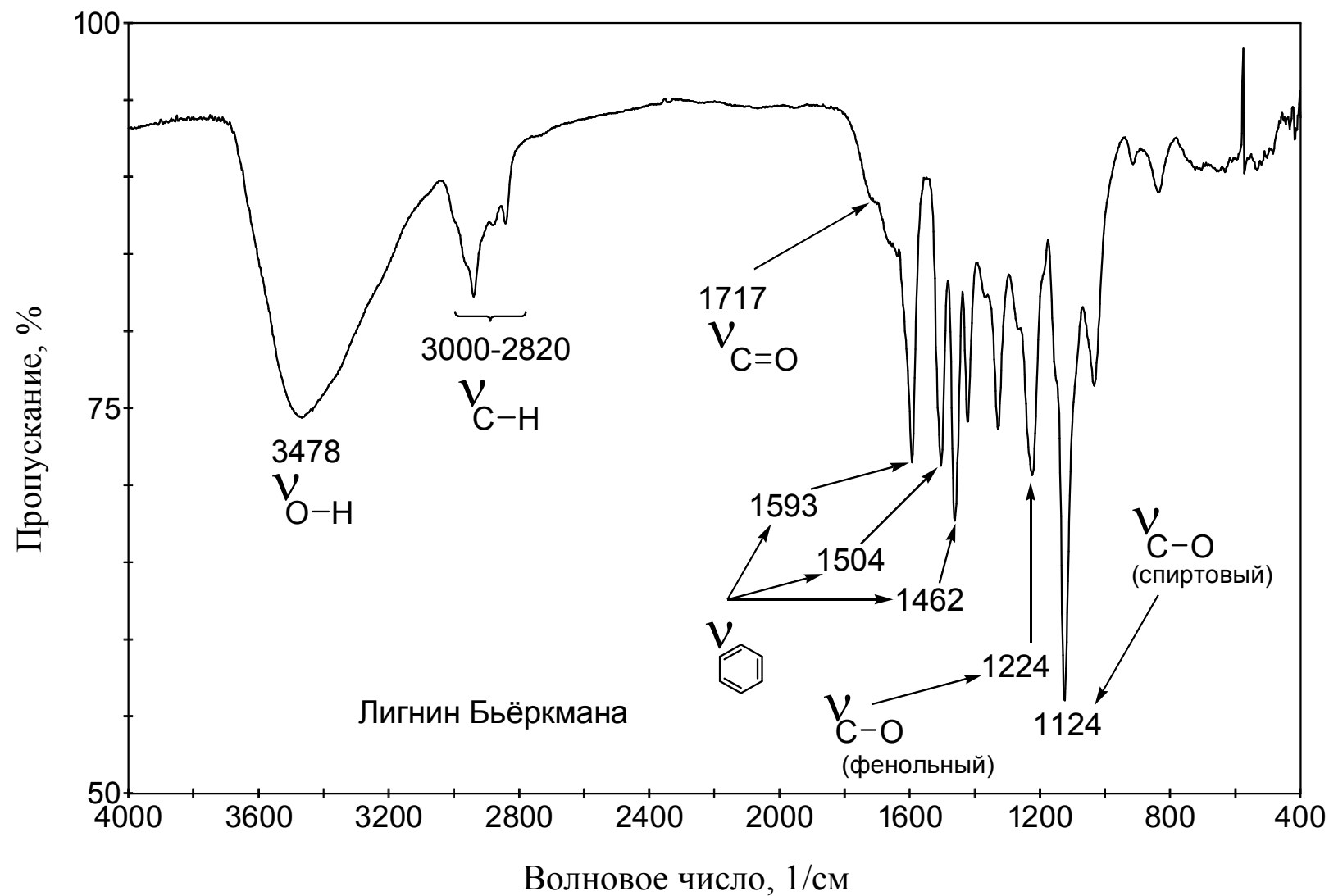
Особенности ИК-спектроскопии природных соединений

ИК-спектр модельного соединения лигнина



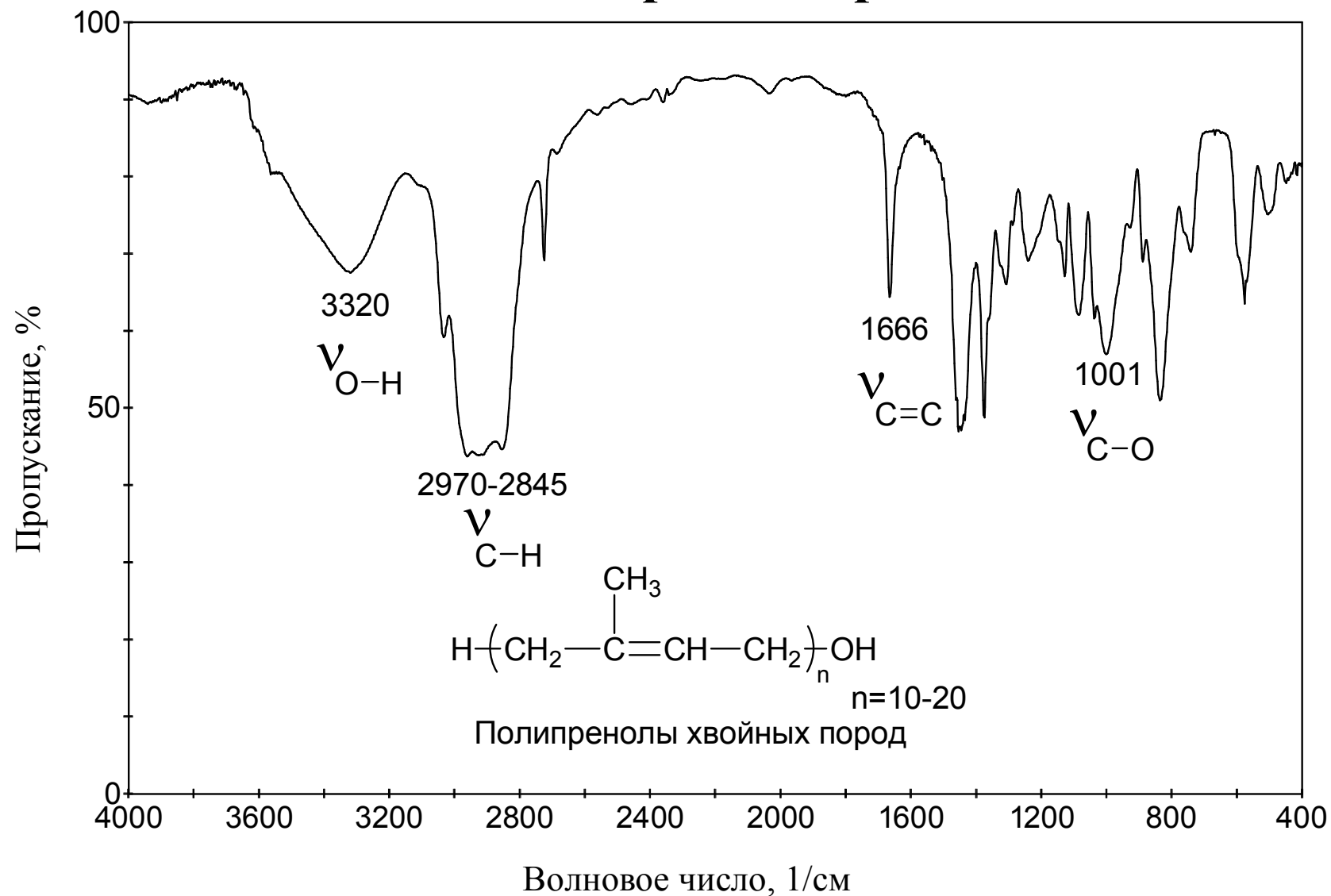
Особенности ИК-спектроскопии природных соединений

ИК-спектр лигнина



Особенности ИК-спектроскопии природных соединений

ИК-спектр полипренола



Особенности ИК-спектроскопии природных соединений

Основные этапы интерпретации **ИК-спектров органических соединений**

1. Анализ области 2500-1500 см⁻¹ для определения непредельных фрагментов: связи C=C, C≡C, C=O, C=N, C≡N, ароматические и гетероароматические кольца.

Особенности интерпретации ИК- спектров

2. Анализ области 4000-2500 см⁻¹ для идентификации функциональных групп: O–H, N–H, S–H, а также связей углерод–водород: Csp₃–H, Csp₂–H, Csp–H, (O=)C–H (альдегид).

А. В. Васильев
Спектроскопия

А. В. Васильев
Спектроскопия

3. Анализ области “отпечатков пальцев” 1500-500 см⁻¹. Определение деформационных колебаний связей О–Н, N–Н, С–Н.

А. В. Васильев
Спектроскопия

Особенности интерпретации ИК- спектров

А. В. Васильев
Спектроскопия

Рекомендуемая литература

1. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К.
Определение строения органических соединений.
М: Мир, 2006.
2. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ. М: Мир, 1992.
3. Беллами Л. Новые данные по ИК-спектрам сложных молекул. М.: Мир, 1971.
4. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. М.: Мир, 1965.
5. Беллами Л. ИК-спектры сложных молекул. М.: Мир, 1963.

ИК-спектроскопия