

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 01.10.2024 12:16:09  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ФГБОУ ВО «Тверской Государственный университет»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Ворончихина Л.И.

27 мая 2024



Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)  
**Спектроскопия органических соединений**

Направление подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль)

Органическая химия

Для студентов 1 курса, очной формы обучения

Составитель: д.х.н., профессор Ворончихина Л.И. \_\_\_\_\_

Тверь, 2021

## I. Аннотация

### 1. Цель и задачи дисциплины

*Цель* данной дисциплины – научить студента-органика устанавливать структуру органических соединений по его спектральным характеристикам.

Развитие органической химии невозможно без использования физических методов исследования и химик-органик должен уметь применять любые методы, которые могут оказать ему помощь в решении стоящих перед ним задач. Применяемые в органической химии физические методы весьма разнообразны. Однако наиболее эффективно используются некоторые виды спектроскопии: ультрафиолетовая, инфракрасная и спектроскопия ядерного магнитного резонанса.

Задачи дисциплины - выбор методов исследования обусловлен как широтой их применения в практике химиков-органиков для установления строения синтезируемых соединений и выяснения их физических и химических свойств, так и оснащенностью соответствующим оборудованием кафедры. В предлагаемом учебно-методическом комплексе в сжатой форме даются основы методов, его применение, практические работы, задачи. Представлены разделы, включающие диагностические материалы, контрольные задачи, задачи для самоподготовки. Примеры подобраны так, чтобы дать возможность будущему специалисту практически использовать этот материал и показать достижения современной химии.

Изложение теории, описание особенностей метода и аппаратуры обычно дается в общем курсе «Физико-химические методы исследования структуры органических соединений».

### 2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина входит в Элективные дисциплины 2 обязательной части Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина «Спектроскопия органических соединений» является базируется на дисциплинах базовой части блока: иностранный язык, философские проблемы химии, компьютерные технологии в науке и образовании.

**3. Объем дисциплины: 6 зачетных единиц, 216 академических часа, в том числе:**

**контактная аудиторная работа:** лекции **15** часов, лабораторные работы - **45** часов, в т. ч. лабораторная практическая подготовка - **45** часов;

**контактная внеаудиторная работа:** контроль самостоятельной работы **10** часов;

**самостоятельная работа:** **119** часов, контроль – **27** часов.

**4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

<b>Формируемые компетенции</b>	<b>Требования к результатам обучения</b> <b>В результате изучения дисциплины студент должен:</b>
<p><b>ОПК-1</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.</p>	<p><b>ОПК-1.1</b> Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2</b> Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.</p>
<p><b>ОПК-2</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.</p>	<p><b>ОПК-2.1</b> Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их.</p> <p><b>ОПК-2.2</b> Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p>

**6. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения**

экзамен во 2-м семестре.

**7. Язык преподавания русский.**

**II. Содержание дисциплины (или модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

**1. Для студентов очной формы обучения**

	<b>Всего</b>	<b>Контактная работа (час.)</b>	<b>Самост.</b>
--	--------------	---------------------------------	----------------

Учебная программа - наименование разделов и тем	(час)	Лекции	Лабораторные работы	Контроль	работа(час.)
<p><b>Введение.</b> Предмет и задачи курса. Спектроскопия как средство исследования органических молекул.</p> <p>Сравнительная характеристика различных видов молекулярной спектроскопии (ИК, УФ, КР), ядерной спектроскопии (ЯМР, ЯКР), спектроскопии ЭПР и использование их как средств исследования органических соединений.</p> <p>Новые возможности в исследовании органических веществ, гамма-резонансная спектроскопия (мессбауэровская), фотоэлектронная и рентгеноэлектронная спектроскопия, рентгеноструктурный и электронографический методы. Применение ЭВМ для установления строения органических соединений.</p>	19	2		5	12
<p><b>Тема 1.</b> Общие сведения о спектрах</p> <p>Характеристика электромагнитного излучения. Основные параметры: длина волны, частота, волновое число.</p> <p>Область оптических спектров: ИК-область, видимая и ультрафиолетовая.</p> <p>Законы поглощения света. Объединенный закон Ламберта-Бэра. Способы изображения спектров поглощения</p>	25	2	4	4	15

<p><b>Тема 2. Инфракрасная спектроскопия</b>          Происхождение спектров. Колебания и спектры двух- и многоатомных молекул. Число полос в спектре. Нормальные колебания. Скелетные и групповые частоты (характеристические). Связь колебательных спектров со строением органических соединений. Анализ частот некоторых групп. Экспериментальные данные по классам органических соединений. Общие сведения о спектроскопии комбинационного рассеяния (СКР). Происхождение спектров СКР и необходимость их применения для полной характеристики колебаний молекул.</p>	32	2	9	4	17
<p><b>Тема 3. Электронные спектры органических молекул</b>          Основные вопросы, решаемые с помощью УФ-спектроскопии. Происхождение электронных спектров. Классификация электронных переходов. Терминология и обозначения, применяемые в электронной спектроскопии: батохромный (красный) и гипсохромный (синий) сдвиги, сольватохромные эффекты, хромофоры, ауксохромы. Электронные спектры основных классов органических соединений. Ненасыщенные соединения,</p>	33	2	8	3	20

<p>карбонильные соединения. Эффекты сопряжения в электронных спектрах: бутадиен, винилоли, полиены C=C-C=O. Эмпирические правила вычисления максимумов <math>\lambda_{\max}</math> полос поглощения в сопряженных системах (правило Вудворда).</p>					
<p><b>Тема 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР)</b>          Основы метода ЯМР. Магнитные свойства ядер. Явление ЯМР в классической трактовке. Принципиальная схема простейшего ЯМР-спектрометра. Химический сдвиг и его измерение. Внешние и внутренние эталоны. Различные шкалы химических сдвигов и соотношение между ними. Использование химических сдвигов в структурном анализе. Таблицы химических сдвигов. Расчет химических сдвигов протонов по аддитивной схеме. Тонкая структура сигналов ЯМР и ее происхождение. Спин-спиновое взаимодействие. Основные сведения о возможности применения ЯМР <math>C^{13}</math>, <math>P^{31}</math>, <math>F^{19}</math> и др.</p>	29	2	8	4	15
<p><b>Тема 5. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)</b>          Физическая природа явлений. Вид спектров ЭПР простейших радикалов. Возможности использования ЭПР в органической химии. Масс-спектроскопия.</p>	33	2	8	3	20

Молекулярная масса и определение молекулярной формулы. Масс-спектроскопический распад. Происхождение и интерпретация масс-спектров					
<i>Тема</i> 6. <b>Рефрактометрические методы</b> Показатель преломления и удельная рефракция. Поляризуемость и ее связь с удельной и молекулярной рефракцией. Структурные инкременты и групповые рефракции. Рефракции связей. Соотношения между рефракциями связей и атомными рефракциями. Границы приложимости аддитивной схемы экзальтации молекулярной рефракции. Применение молекулярной рефракции для определения строения органических соединений, особенности структуры, выявляемые с помощью молекулярной рефракции	35	3	8	4	20
<b>контактная внеаудиторная работа</b>	10				
<b>Итого:</b>	<b>216</b>	<b>15</b>	<b>45</b>	<b>27</b>	<b>119</b>

### III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем (в строгом соответствии с разделом II РПД)	Вид занятия	Образовательные технологии
--	-------------	----------------------------

Тема 1. Общие сведения о спектрах Характеристика электромагнитного излучения.	Лекция  Лабораторные работы	Традиционные (фронтальная лекция)  Технология проблемного обучения Групповая работа
<b>Тема 2. Инфракрасная спектроскопия</b>	Лекция  Лабораторные работы	Традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений и задач)  Технология проблемного обучения Групповая работа
<i>Тема 3. Электронные спектры органических молекул</i>	Лекция  Лабораторные работы	Традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений и задач)  Технология проблемного обучения Групповая работа
<i>Тема 4. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР)</i>	Лекция  Лабораторные работы	Традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений и задач)  Технология проблемного обучения Групповая работа
<i>Тема 5. Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР)</i>	Лекция  Лабораторные работы	Традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений и задач)  Технология проблемного обучения Групповая работа
<i>Тема 6. Рефрактометрические методы</i>	Лекция  Лабораторные работы	Традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений и задач)  Технология проблемного обучения Групповая работа





	один сигнал в $^1\text{H}$ -ЯМР-спектре: $\text{C}_5\text{H}_{12}$ , $\text{C}_5\text{H}_{10}$	Ответ верный без объяснений – 1 балл (удовлетворительно)
<b>ОПК-2.1</b>	<p>1. Как различить по ИК-спектрам ацетонитрил и анилин.</p> <p>2. Какому из приведенных соединений соответствует данные ПМР-спектра, м.д.: 7,3;10,0 а) бензойная кислота, б) бензиловый спирт</p>	<p>Ответ правильный с объяснением и примерами – 3 балла (отлично)</p> <p>Ответ верный без примеров – 2 балла (хорошо)</p> <p>Ответ верный без объяснений – 1 балл (удовлетворительно)</p>
<b>ОПК-2.2</b>	<p>1. Какому из приведенных ниже соединений соответствуют данные ИК-спектра, <math>\text{cm}^{-1}</math>: 2870, 2220, 1465, 1420, 1380, 1200</p> <p>а) <i>n</i>-метоксибензнитрил</p> <p>б) ацетиленкарбоновая кислота</p> <p>в) нитрил метоксипропионовой кислоты</p> <p>2. Предскажите число ращеплений для каждого протона в следующих молекулах</p> <p>а) <math>\text{CHBrCH}_3</math></p> <p>б) <math>\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{Br}</math></p>	<p>Ответ правильный с объяснением и примерами – 3 балла (отлично)</p> <p>Ответ верный без примеров – 2 балла (хорошо)</p> <p>Ответ верный без объяснений – 1 балл (удовлетворительно)</p>

## V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 1. Рекомендуемая литература

#### Основная:

- Орлова А.М. Органическая химия [Электронный ресурс]: учебное пособие. - Москва : Московский государственный строительный университет, Ай Пи Эр Медиа, ЭБС АСВ, 2016. - 230 с. - Книга находится в базовой версии ЭБС IPRbooks. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/48034.html>

## **б) Дополнительная литература:**

1. Маряхина В.С. Теоретические основы методов спектрального анализа [Электронный ресурс]: учебное пособие / В.С. Маряхина, Е.А. Кунавина, Е.А. Строганова. — Электрон. текстовые данные. — Оренбург: Оренбургский государственный университет, ЭБС АСВ, 2016. — 135 с. — 978-5-7410-1517-9. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/69953.html>

### 2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

### 3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

### 4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Ин-тернет», необходимых для освоения дисциплины

1. <http://www.xumuk.ru/>

2. <http://nehudlit.ru/books/subcat283.html>

3. [http://www.krugosvet.ru/enc/nauka\\_i\\_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html](http://www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/himiya/BIOHIMIYA.html)

4. <http://elibrary.ru/>

5. <http://www.medbook.net.ru/23.shtml>

6. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/kolman/index.htm>

## **VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины**

### **ПРИМЕРЫ ЗАДАЧ И УПРАЖНЕНИЙ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ**

1. В ЯМР-спектре соединения, имеющего состав  $C_2H_4Br$ , имеется дублет в сильном поле 2,5 м.д. и квартет в слабом поле 5,8 м.д. с соотношением площадей 3:1. Какое строение имеет соединений?
2. Напишите структуры соединений  $C_3H_3Cl_5$  (а) и  $C_3H_3Cl_3$  (б), которым соответствуют следующие данные ЯМР: а) триплет 4,52 м.д. и дублет 6,07 м.д. с соотношением площадей сигнала протона 1:2; б) синглет 2,20 м.д. и дублет 4,02 м.д. с соотношением площадей 3H : 2H.
3. Предложите структурные формулы веществ состава  $C_8H_7OCl$  и их ИК-характеристики.
4. Вещество состава  $C_8H_{10}O$  имеет два изомера. Предложите их структуры и укажите данные их ПМР-спектров.
5. Определите структурную формулу соединения состава  $C_7H_8SH$ , если в спектре ЯМР этого соединения обнаружены сигналы при 7,2; 3,27; 2,30 м.д.

6. Предскажите ИК- и ЯМР-спектры соединений:  $\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_4\text{-OCH}_2\text{CH}_3$  и  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ .
7. Укажите различия в ИК-спектрах ацетона, ацетоуксусного эфира и ацетофенона.
8. Предскажите структуру и спектральные данные соединения состава  $\text{C}_3\text{H}_3\text{Cl}_5$ .
9. Как различить по ИК- и ЯМР-спектрам толуол, *n*-ксилол и мезитилен.
10. Соединения  $\text{CHCl}_2\text{-CHCl}_2$  ( $\delta=6,0$  м.д.) и  $\text{CCl}_3\text{-CH}_2\text{Cl}$  ( $\delta=3,9$  м.д.) дают в ЯМР-спектрах синглеты. Объясните происхождение синглетов и различия в химических сдвигах.
11. При комнатной температуре циклогексан имеет один пик в ЯМР-спектре. При температуре до  $-70^\circ\text{C}$  сигнал уширяется, а при  $-100^\circ\text{C}$  разделяется четко на два пика. Объясните наблюдаемое явление.
12. Исследуемое соединение содержит метильную и метиленовую группы и растворяется в воде, метаноле, этаноле,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{CHCl}_3$ , бензоле, ацетоне. Какие из названных растворителей следует использовать для записи спектров ЯМР?
13. Предложите ИК- и ЯМР-спектральные характеристики для бензилацетата.
14. Как с помощью ЯМР-спектров различить соединения состава  $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$ ?
15. Как с помощью ИК-спектров различить ацетилацетон, диметилсульфоксид и ацетон?
16. Определите структуру соединения  $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}$ , если в спектре присутствуют следующие полосы поглощения: 1680 (с.); 1600 (ср.); 1580 (ср.); 1450 (ср.); 1360 (с.); 1265 (с.); 755 (с.); 690 (с.)  $\text{cm}^{-1}$ .
17. Фенол с диоксаном образует водородную связь. Предскажите, как изменится прочность такой водородной связи при введении в молекулу фенола следующих заместителей: *n*- $\text{CH}_3$ ; *m*- $\text{Cl}$ ; *n*- $\text{Cl}$ ; *n*- $\text{NO}_2$ ; *m*- $\text{CH}_3\text{O}$ ; *n*- $\text{CH}_3\text{O}$ .
18. В ИК-спектре цис 1,2-циклопентандиола полоса поглощения ОН-группы имеет более низкую частоту, чем полоса поглощения свободной ОН-группы; и эта полоса не исчезает даже при сильном разбавлении. Приведите возможные объяснения.
19. В какие функциональные группы входят атомы кислорода и азота в соединении с брутто формулой  $\text{C}_7\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_7$ , если в ИК-спектре наблюдаются интенсивные полосы при  $1590 \text{ cm}^{-1}$  и  $1330 \text{ cm}^{-1}$ , широкая полоса в области  $3500\text{-}3360 \text{ cm}^{-1}$  и полосы при  $1125$  и  $1047 \text{ cm}^{-1}$ .

20. В ИК-спектре ацетилацетона наблюдаются следующие полосы поглощения: 1730; 1680; 1640  $\text{см}^{-1}$ . Сделайте отнесение этих полос, учитывая таутомерию соединения.

21. В ПМР-спектре лаурокса-9 (неионогенное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{11}\text{H}_{23}\text{COO}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_n\text{H}$ , где  $n_{\text{ср}}=9$ ) обнаружены следующие сигналы,  $\delta$  м.д.: 0,80; 1,20; 2,15; 3,40; 4,0; 2,85; а в ИК-спектре имеются полосы поглощения,  $\text{см}^{-1}$ : 3400, 2930, 2860, 1740, 1380, 720, 1355, 1055, 1115. Сделайте отнесение полос и сигналов в спектрах лаурокса-9.

22. В ИК-спектре синтанола ДС-10 (неионогенное ПАВ общей формулы  $\text{RO}(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})_n\text{H}$ , где  $n_{\text{ср}}=10$ ) имеются следующие полосы поглощения,  $\text{см}^{-1}$ : 3450, 2870, 2935, 1465, 725, 1350, 1050, 1100 и в ПМР-спектре следующие сигналы  $\delta$  м.д.: 0,80; 1,20; 3,45; 4,05.

23. Какие полосы поглощения в ИК-спектре и резонансные сигналы протонов в ЯМР-спектре можно предсказать для лаурата натрия (анионное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{12}\text{H}_{23}\text{O}_2\text{Na}$ ).

24. В ПМР-спектре лауратамоноэтаноламмония (растворитель  $\text{CCl}_4$ ), анионное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{14}\text{H}_{31}\text{O}_3\text{N}$ , имеются следующие сигналы  $\delta$  м.д.: 0,84; 1,24; 2,0; 2,82; 3,56; 7,6 с интегральными интенсивностями (относительные единицы): 3, 8, 2, 2, 2, 4 соответственно. В ИК-спектре обнаружены следующие полосы поглощения,  $\text{см}^{-1}$ : 3300, 3050, 2960, 2930, 2860, 1560, 1425, 1465, 1380, 1180-1350, 725. Сделайте отнесение данных ИК- и ПМР-спектров в соответствии со структурой соединения.

25. Предложите ИК- и ПМР-спектры для октилсульфоната натрия (анионное ПАВ общей формулы  $\text{C}_8\text{H}_{17}\text{SO}_3\text{Na}$ ).

26. Предложите ИК- и ПМР-спектры для децилсульфата натрия (анионное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{10}\text{H}_{21}\text{SO}_4\text{Na}$ ).

27. В ПМР-спектре моноцетилфосфата натрия (анионное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{16}\text{H}_{33}\text{PO}_4\text{Na}_2$ ) имеются следующие сигналы,  $\delta$  м.д.: 0,80; 1,20; 3,65 с интегральными интенсивностями (относительные единицы): 3, 28, 2 соответственно. В ИК-спектре обнаружены следующие полосы поглощения,  $\text{см}^{-1}$ : 2965, 2930, 2860, 1470, 1380, 1160, 1140, 1080, 1110, 1010, 725. Соотнесите данные спектров со структурой соединения.

28. В ИК-спектре N-децилпиридиний хлорида (катионное ПАВ общей формулы  $\text{C}_{15}\text{H}_{26}\text{NCl}$ ) имеются следующие полосы поглощения,  $\text{см}^{-1}$ : 3025, 2930, 2860, 1635, 1585, 1505, 1490, 1470, 1380, 780, 685, 720. В ПМР-спектре имеются следующие сигналы протонов,  $\delta$  м.д.: 0,81; 1,20; 1,85; 4,70; 8,26; 8,71; 9,40 с интегральными интенсивностями 3, 8, 2, 2, 2, 1, 2 соответственно.

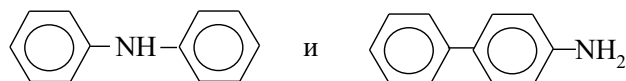
Сделайте вывод о структуре соединения и предложите отнесение сигналов и полос в молекуле.

29. Предложите ИК- и ПМР-спектры для децилбензилдиэтиламмоний хлорида (катионное ПАВ общей формулы  $C_{21}H_{38}NCl$ ).

30. Предложите ИК-, УФ- и ЯМР-спектральные данные для N-бензилпиперидиний хлорида (катионное ПАВ общей формулы  $C_{23}H_{37}NCl$ ).

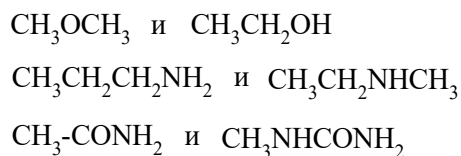
31. В анилине хромофором является не только бензольное кольцо, но и неподеленная электронная пара азота. Оба хромофора сопряжены друг с другом. Образование соли при действии разбавленной серной кислоты изменяет спектр анилина. В УФ-спектре анилина обнаружена поглощение при 286 нм и 234 нм. Сделайте отнесение полос и объясните отличия в положении главных полос соли анилина ( $\lambda=254$  нм).

32. Строение органического соединения общей формулы  $C_{12}H_{11}N$  может быть представлено следующими двумя структурами:



Предложите данные ИК-спектров для различия этих структур

33. Как можно различить следующие соединения, используя ИК-спектральные данные:



## ПРИМЕРНЫЕ ЗАДАНИЯ ДЛЯ ПИСЬМЕННОГО ОПРОСА

### Задание 1.

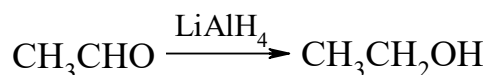
1. Как изменится положение полос поглощения в УФ-спектре *n*-нитрофенола при замене изооктана на этанол?
2. Предложите ИК-спектральные характеристики ацетона, анилина и формальдегида.

### Задание 2.

1. Как различить по ПМР-спектрам ацетонитрил, метилакрилат и ацетон?
2. К кому типу электронных переходов относятся полосы максимального поглощения 2,6-диметилгептадиен-2,5-она-4 260 нм ( $\epsilon=24000$ ) и 380 нм ( $\epsilon=80$ ).

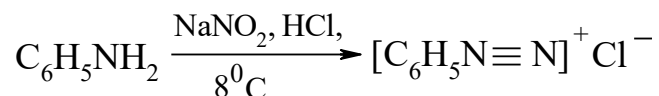
### Задание 3.

1. Какие соединения можно различить по УФ-спектрам?
2. Какие характеристические частоты можно использовать для контроля за ходом реакции восстановления



### Задание 4.

1. Как с помощью ИК-спектроскопии можно контролировать ход реакции diazotирования анилина



2. В спектре ПМР смеси бензола и циклогексана содержатся два сигнала (1,4 и 7,3 м.д.) с соотношением интенсивностей 2:1. Определите количественный состав смеси.

### Задание 5.

1. Какие изменения можно наблюдать в ИК-спектре этанола при проведении реакции этерификации взаимодействием этанола с уксусной кислотой.
2. Соединения  $\text{CHBr}_2\text{-CHBr}_2$  ( $\delta=6$  м.д.) и  $\text{CBr}_3\text{-CH}_2\text{Br}$  ( $\delta=3,9$  м.д.) дают в спектрах ЯМР синглеты вследствие химической эквивалентности атомов водорода. Объясните различия в химических сдвигах.

## ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ К ЭКЗАМЕНУ

1. Используя таблицу хромофорных групп, решить, можно ли использовать спирты в качестве растворителей в УФ-спектроскопии.
2. Почему полосы поглощения в УФ-спектрах значительно шире, чем в ИК-спектрах?
3. На что следует обращать внимание, если снимается ИК-спектр твердого вещества в виде раствора?
4. Какое значение имеют характеристические частоты в ИК-спектроскопии?
5. Укажите границы в электромагнитном спектре для ультрафиолетовой области.
6. Какие группы атомов называют хромофорами?
7. Приведите примеры наиболее часто встречающихся хромофоров.

8. Что называется батохромным сдвигом? Гипсохромным сдвигом?
9. В каких системах наблюдается батохромный сдвиг? Сделать таблицу хромофорных групп.
10. Какая концентрация растворов является наиболее оптимальной для снятия УФ-спектров?
11. Какие растворители принято считать идеальными для снятия УФ-спектров?
12. Почему УФ-спектры называют электронными спектрами?
13. Дайте определение термину «волновое число».
14. Что выражает собой термин «волновое число»?
15. Что называют оптической плотностью?
16. Напишите выражение для закона Ламберта – Бера.
17. Дайте определение молярному коэффициенту поглощения.
18. От каких факторов зависит точное положение максимума поглощения?
19. Укажите границы области инфракрасной спектроскопии.
20. Переведите область длин волн от 25 до 2,5 мкм в волновые числа.
21. Почему инфракрасные спектры называют колебательными?
22. Какие колебания называют валентными, деформационными?
23. Какие поглощения называют характеристическими?
24. Какие вопросы решаются с помощью ИК-спектроскопии?
25. Назовите основные области ИК-спектра.
26. Какую область ИК-спектра называют «областью отпечатков пальцев»?
27. Почему в УФ-спектроскопии при снятии спектра необходимо точно указывать молярную концентрацию и толщину слоя исследуемой пробы в отличие от ИК-спектроскопии?



28. В каких единицах выражают концентрацию раствора при снятии УФ-спектров?
29. Как обычно готовят разбавленные растворы для снятия УФ-спектров?
30. Почему при снятии  $^{13}\text{C}$  ЯМР-спектров растворы должны быть как можно более концентрированными?
31. Какие растворители используют при снятии  $^1\text{H}$  ЯМР-спектров?
32. Как можно снять ИК-спектр твердого вещества?
33. Какие методы подготовки образцов для снятия ИК-спектров вы знаете?
34. Почему необходимо обеспечивать высокую чистоту ампулы и растворителя при снятии ЯМР-спектров?
35. Какие колебания в ИК-области следует относить к валентным, а какие к деформационным?
36. Чем вызвано появление в ИК-спектре большого количества полос деформационных колебаний?
37. При снятии ПМР-спектров можно использовать внутренний или внешний стандарт (эталонное вещество). Назовите эти вещества.
38. Что выражает термин «интегральная интенсивность» в ЯМР-спектроскопии?
39. В каких единицах измеряются смещения резонансных сигналов протонов в ПМР-спектрах?
40. Какие шкалы резонансных сигналов протонов вы знаете?
41. Что выражает собой электронный спектр поглощения вещества?

## ПРИМЕРЫ ЗАДАНИЙ ДЛЯ КОНТРОЛЬНЫХ РАБОТ

### *Контрольная работа №1*

1. Соединение имеет структурную формулу  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CONH}_2$ . Каковы должны быть спектральные характеристики ИК-, УФ- и ЯМР-спектров?

2. Укажите особенности ИК-спектров следующих соединений: ацетон, уксусная кислота, этилацетат.
3. Как различить по ИК- и ЯМР-спектрам следующие соединения: ацетонитрил, анилин, нитрометан?
4. Предскажите основные характеристики ПМР-спектров следующих соединений: метилэтилкетон, N,N-диметиланилин, *n*-крезол.
5. Переведите химический сдвиг в герцах в единицы  $\delta$  для следующих соединений,  $^1\text{H}$  ЯМР-спектр которых регистрировался на спектрометре с рабочей частотой 60 МГц:
  - а) 131 Гц
  - б) 287 Гц
  - в) 451 Гц

### *Контрольная работа №2*

1. Сколько резонансных сигналов можно наблюдать в спектре  $^{13}\text{C}$  ЯМР следующих соединений:
  - а) 1,1-диметилциклогексан
  - б)  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_3$
  - в) 3-метилпентин-1
2. Как с помощью ИК-спектроскопии можно различить соединения в следующих парах:
  - а)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{COCl}$
  - б)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{COOCH}_3$
  - в)  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ;  $\text{CH}_3\text{CHO}$
3. Как должна измениться частота поглощения карбонильной группы  $\text{C}=\text{O}$  в ряду: ацетон – хлорацетон – трифторацетон?
4. В УФ-спектрах 4-диэтиламинобензойной кислоты, снятых в этаноле, проявляется полоса поглощения с максимумом 288 нм ( $\epsilon=19000$ ), а в растворе хлороводородной кислоты – 270 нм ( $\epsilon=1000$ ). В чем причина различия в спектрах?
5. Рассчитайте концентрацию бензойной кислоты при значении оптической плотности 1,9 ( $\lambda_{\text{max}}=228$  нм,  $\epsilon=10660$ ) в кювете толщиной 1 см.

### **VII. Материально-техническое обеспечение**

Весы JW - 1 электронные (предел взвешивания 1500 г)  
 Весы JW - 1 электронные (предел взвешивания 1500 г)  
 Холодильник "Стинол 232"  
 Шкаф сушильный ШСС-80

Горелка (M082-06990)  
 Мойка (промыв. устройсто) (M082-07017)  
 Плитка электрическая  
 Стол приставной  
 Стол с дверцами  
 Столик подъемный (M082-07046)  
 Сушилка для пипеток  
 Шкаф 2-х тумбовый  
 Шкаф вытяжной  
 Шкаф для материалов  
 Электроплитка для бани 0,6 кВт, столы, стулья, доска ученическая

### **VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины**

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Добавлены новые пособия в основной список литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета