

**Химический факультет
Кубанского государственного университета**

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**

Методические указания к практическим
занятиям по курсу: "Физические методы исследования"

(для студентов химического факультета)

Краснодар 2001 г

**Химический факультет
Кубанского государственного университета**

**ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ
МОЛЕКУЛЯРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ**

Методические указания к практическим
занятиям по курсу: "Физические методы исследования"

(для студентов химического факультета)

Краснодар 2001 г

Печатается по решению учебно-методической комиссии
химического факультета

Представлено кафедрой общей и неорганической химии

Составители: Н.Н. Буков, канд. хим. наук, доцент
С.Л. Кузнецова, канд.хим. наук, доцент
Т.В. Костырина, канд.хим. наук, доцент

Редактор: В.Т. Панюшкин, док. хим. наук, профессор

Предисловие редактора

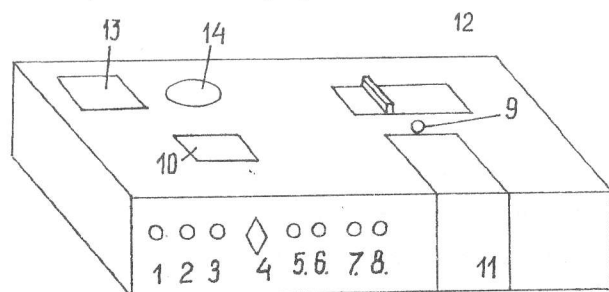
В настоящее время физические методы определения структуры молекул занимают центральное место в арсенале средств используемых химиками. Эти методы не только сокращают время исследования, но и дают принципиально новую информацию о строении соединений и их свойствах.

Среди физических методов исследования органических соединений наибольшее распространение получили спектральные методы и, в частности, молекулярная спектроскопия. Она широко и с успехом применяется для изучения строения и свойств молекул, а также природы и сил межмолекулярных взаимодействий. Важность и широта применения данных спектральных методов исследования сделали необходимым изучение не только физических основ этих методов, но и приобретения практических навыков их использования. Однако, существующих учебных пособий, которые служили бы для выработки и закрепления элементарных навыков истолкования спектральных данных и результатов измерений важных физических параметров молекул, явно недостаточно.

Настоящее практическое руководство по молекулярной спектроскопии частично восполняет этот пробел. Данное методическое пособие составлено преподавателями кафедры общей и неорганической химии химического факультета Кубанского государственного университета для студенческого практикума по курсу: "Физические методы исследования". Руководство содержит материалы, способствующие выработки практических навыков расшифровки молекулярных спектров и раскрывает основные прикладные задачи, которые могут быть решены с помощью молекулярной спектроскопии.

Практические работы по электронным спектрам поглощения

Общий вид спектрофотометра "Specord UV VIS"

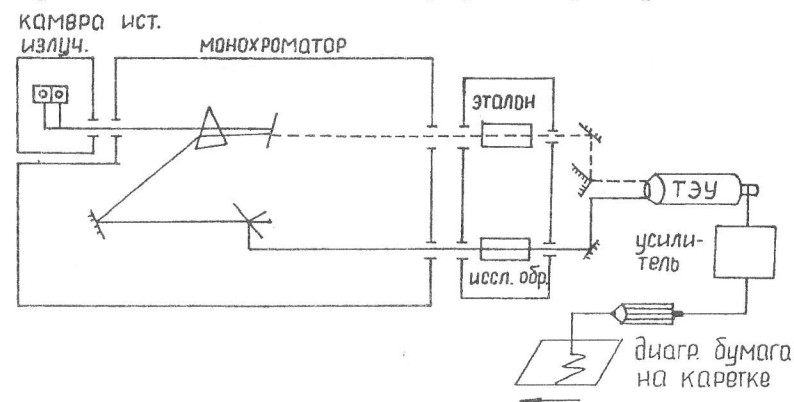


1. Тумблер «сеть».
2. Питание дейтериевой лампы (включать через 30 сек. нагрев.).
3. Питание лампы накаливания.
4. Режим движения каретки: а - «быстро назад», б - «стоп», в - «быстро вперед», г - «сканирование без возврата каретки», д - «сканирование с возвратом каретки».
5. Пуск каретки.
6. Стоп каретки.
7. Режим работы ФЭ4: а - работа в однолучевом режиме, б - запись спектра по оптической плотности (-0,1-1, 4Д), в - в % пропускания (0-100%), г - в % пропускания (0-20% Т), д - в 0 пропускания (80-100% Т), е - в % пропускания (75-125% Т).
8. Регулировка линии 100% Т.
9. Ручное передвижение каретки.
10. Режим сканирования по времени и волновым числам.
11. Камера образцов.
12. Каретки с диаграммной бумагой.
13. Камера источников излучения.
14. Осушительный патрон с SiO_2 .

Принцип работы на спектрофотометре "Specord UVVIS"

Спектрофотометр "Specord UV VIS" предназначен для записи спектров поглощения химических веществ в области $50000-12500 \text{ см}^{-1}$ (200-800 нм). "Specord UV VIS" представляет собой прецизионный двухлучевой сканирующий спектрофотометр (см. принципиальную схему). Свет от выбранного источника излучения (дейтериевая лампа - ультрафиолетовое излучение $50000-12500 \text{ см}^{-1}$, лампа накаливания - видимая область - $30000-12500 \text{ см}^{-1}$) попадает в монохроматор, где разлагается кварцевой призмой на монохроматические составляющие, далее через систему зеркал и линз излучение попадает на прерыватель, где разделяются на два когерентных пучка. Один из них проходит через эталонный образец, другой через исследуемое вещество и, затем попадает на приемник излучения, сравнивающий интенсивности обеих и управляющий реверсионным мотором. Реверсионный мотор связан с пером, которое записывает величину разности I_0 и I_x на диаграммной бумаге.

Принципиальная схема спектрофотометра "Specord UVVIS"



Порядок работы на спектрометре "Specord UVVIS"

1. Установить все тумблера включения источников излучения и режимов работ в начальное положение («нулевое»).

2. Подсоединить шнур питания в розетку сети 220x5 а.

3. Включить питание прибора тумблером 4 «сеть».

4. Включить питание необходимого источника излучения.

5. Тумблером «режим работы» установить необходимый диапазон измеряемого поглощения (пропускания).

6. Кнопками «быстро вперед» или «быстро назад» установить начальное волновое число, при этом каретку удерживать пальцем в среднем положении.

7. Установить каретку в начальное положение.

8. Закрепить диаграммную бумагу, сделать отметку пером начального волнового числа.

9. Поместить образцы в соответствующие каналы и включить сканирование спектра кнопкой «пуск».

10. При включении прибора сначала выключаем источники излучения, а затем – прибор кнопкой «сеть».

Лабораторная работа №1.

Градуировка спектрофотометра по пропусканию с помощью стандартных растворов

Электронные спектры поглощения записываются в виде зависимости величины поглощения от длины волны (λ нм.) или волнового числа (ν см.⁻¹, $\nu=1/\lambda$). Величина поглощения может быть выражена:

$A(\%)$ – процентом поглощения $\{A = (I_0 - I) / I_0 \cdot 100\}$, где I_0 , I – интенсивность падающего и прошедшего монохроматического излучения соответственно;

$T(\%)$ – процентом пропускания ($T = I / I_0 \cdot 100$);

D – оптической плотностью ($D = \lg I_0 / I$);

ϵ – коэффициентом молярного поглощения (л /м·см) или логарифмом ($\lg \epsilon$).

Вид спектра зависит от выбора координат. Если спектр записан в процентах пропускания или поглощения или в оптической плотности, то вид спектра зависит от концентрации и толщины поглощающего слоя. При использовании в качестве параметра интенсивности $\lg \epsilon$ или $\lg D$ концентрация и толщина слоя не влияют на форму кривой.

Шкалу оптической плотности проверяют, используя растворы соединений высокой чистоты известной концентрации, поглощение которых надежно определено. Поскольку значения оптической плотности могут меняться из-за малейших неточностей в определении положения полос, следует использовать соединения с достаточно широкими полосами поглощения. Поэтому в качестве стандартных растворов обычно применяют растворы хромата калия, сульфата кобальта-аммония и сульфата меди, спектры поглощения которых, удовлетворяют этим требованиям.

Приборы и принадлежности: спектрофотометр типа "Specord UV VIS", две кюветы толщиной 1 см, стандартный раствор, дистиллированная вода.

Порядок работы

1. Приготовить следующие стандартные растворы:

Раствор хромата калия. Растворить 0,04 г K_2CrO_4 в 0,05 н. растворе КОН. Перенести раствор в мерную колбу емкостью 1 л и разбавить до метки тем же раствором щелочи. Раствор перемешать и применять нефилтрованным.

Раствор сульфата меди. Навеску сульфата меди $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ (20,00 г) поместить в стакан и залить дистиллированной водой, к которой прибавлено 100 мл серной кислоты ($d = 1,835$ г/мл). После растворения навески раствор перенести в мерную колбу емкостью 1 л и разбавить дистиллированной водой до метки. Раствор перемешать и применять нефилтрованным.

2. Тщательно вымыть и высушить сантиметровые кюветы

2. Записать спектр одного из стандартных растворов относительно дистиллированной воды - сульфата меди в интервале 400-750 нм или хромата калия в интервале 215-500 нм.

3. Сравнить измеренную оптическую плотность раствора с данными эталона (см табл. ниже). Для этого рассчитайте ΔD по формуле:

$$\Delta D = (D_{теор.} - D_{эксп.} / D_{теор.}) \cdot 100\%$$

При правильной работе прибора кривые должны совпадать в пределах 1-2%.

Таблица

Оптическая плотность (D) стандартных растворов (толщина слоя 1,0 см).

Длина волны, λ , нм	$D(K_2CrO_4)$	$D(CuSO_4)$	Длина волны, λ , нм	$D(K_2CrO_4)$	$D(CuSO_4)$
205	—	—	420	0,1261	0,0016
210	—	—	430	0,0841	0,0014
215	1,4318	—	435,8(Hg)	0,0650	0,0013

Продолжение таблицы

Длина волны λ , нм	$D(K_2CrO_4)$	$D(CuSO_4)$	Длина волны λ , нм	$D(K_2CrO_4)$	$D(CuSO_4)$
220	0,4559	—	440	0,0535	0,0012
225	0,2281	—	450	0,0325	0,0011
230	0,1675	—	460	0,0173	0,0011
235	0,2076	—	470	0,0083	0,0012
240	0,2993	—	480	0,0035	0,0014
245	0,3893	—	490	0,0009	0,0018
250	0,4962	—	491,6(Hg)	—	0,0019
255	0,5719	—	500	—	0,0026
260	0,6345	—	501,6(Hg)	—	0,0028
265	0,6968	—	510	—	0,0011
270	0,7447	—	520	—	0,0135 055
275	0,7620	—	530	—	0,0155 079
280	0,7235	—	540	—	0,0219 111
285	0,5952	—	546,1(Hg)	—	0,0292 135
290	0,4295	—	550	—	0,0368 155
295	0,2782	—	560	—	0,0390 219
300	0,1518	—	570	—	0,0487 292
305	0,0809	—	578(Hg)	—	0,0518 362
310	0,0458	—	580	—	0,0680 390
315	0,0434	—	587,6(Hg)	—	0,0885 487
320	0,0620	—	590	—	0,1125 518
325	0,0915	—	600	—	0,0143 620
330	0,1475	—	610	—	0,0038 885
335	0,2187	—	620	—	0,0055 1125
340	0,3143	—	630	—	0,0079 1430
345	0,4202	—	640	—	0,1800
350	0,5528	0,0090	650	—	0,2240
355	0,6948	—	660	—	0,2740
360	0,8297	0,0063	667,8(Hg)	—	0,3190

Продолжение таблицы

Длина волны, λ , нм	$D(K_2CrO_4)$	$D(CuSO_4)$	Длина волны, λ , нм	$D(K_2CrO_4)$	$D(CuSO_4)$
365	0,9393	—	670	—	0,3320
370	0,9914	0,0046	680	—	0,3920
375	0,9872	—	690	—	0,4590
380	0,9281	0,0035	700	—	0,5270
385	0,8281	—	710	—	0,5920
390	0,6840	0,0028	720	—	0,6560
395	0,5229	—	730	—	0,7150
400	0,3872	0,0023	740	—	0,7680
404,7(Hg)	0,2840	0,0021	750	—	0,8170
410	0,1972	0,0019	780	—	—

4. При расчёте длин волн (нм.) по волновым числам ($см.^{-1}$) используйте выражение:

$$\lambda \text{ (нм.)} = 10^7 / \nu \text{ (см.}^{-1}\text{)}$$

5. Результаты эксперимента оформить в виде таблицы:

Число изм.	Волновое число, ν , $см.^{-1}$	Длина волны, λ , нм	Оптическая плотность эксп., $D_{эксп}$	Оптическая плотность теор., $D_{теор}$	ΔD , %

Лабораторная работа №2.

Определение основных характеристик электронных полос поглощения

В настоящей работе предлагается определить следующие характеристики электронных полос поглощения:

а) волновые числа в максимумах и минимумах полос поглощения ν_{\max} и ν_{\min} ;

б) коэффициенты экстинкции в максимумах и минимумах полос поглощения ϵ_{\max} и ϵ_{\min} ;

в) полуширину полос поглощения $\Delta\nu_{1/2}$;

г) тип перехода электронных полос поглощения, помня, что электронные спектры поглощения обусловлены в основном $n \rightarrow \pi^*$ и $\pi \rightarrow \pi^*$ переходами. Причем $n \rightarrow \pi^*$ переходам обычно соответствуют менее интенсивные и более длинноволновые полосы поглощения.

Приборы и принадлежности: спектрофотометр "Specord UV VIS", две прямоугольные кюветы 1см, раствор исследуемого вещества с известной концентрацией, растворитель, миллиметровая бумага, аналитические весы.

Порядок работы

1. Измерить по отношению к растворителю электронный спектр поглощения раствора с известной концентрацией поглощающего вещества. В качестве последнего может быть выбрано почти любое органическое соединение, имеющее полосы в области 210-800 нм (новокаин, пара-замещенные бензола, рихлокоин и др.)

2. Представить измеренный спектр в координатах ϵ_i / λ_i и ϵ_i / ν_i , учитывая, что ϵ_i связан с D_i уравнением:

$$\epsilon_i = D_i / C \cdot l$$

где D_i – оптическая плотность раствора на i -й длине волны;

C – концентрация раствора, моль/л;

l - толщина слоя раствора;

ϵ_i - коэффициенты экстинкции на i -й длине волны,

ν_i - волновое число, см^{-1} .

3. Определить значение $\nu_{\text{макс}}$ (для широких полос за $\nu_{\text{макс}}$ принимается значение ν , соответствующее точке пересечения кривой поглощения с прямой, проходящей через середины хорд, проведенных параллельно оси абсцисс вблизи максимума полосы поглощения).

4. Определить значение коэффициентов экстинкции $\epsilon_{\text{макс}}$ и $\epsilon_{\text{мин}}$ соответствующее волновым числам $\nu_{\text{макс}}$ и $\nu_{\text{мин}}$.

5. Определить полуширину полосы поглощения $\Delta\nu_{1/2} = \nu_1 - \nu_2$, где ν_1 и ν_2 - волновые числа, соответствующие точкам кривой поглощения с коэффициентом экстинкции $\epsilon_{\text{макс}}/2$.

6. Определить тип электронного перехода и провести отнесение полос поглощения исследуемого органического вещества (см. Приложение I).

7. Найденные параметры i -полосы поглощения исследуемого вещества внести в таблицу:

№	Волнов. число, $\nu_i, \text{см}^{-1}$.	$\Delta\nu_{1/2}$	Длина волны $\lambda_i, \text{нм}$.	Кoeffиц. экстинкц. ϵ_i	Тип электрон. перехода	Хромофор

Лабораторная работа № 3.

Определение концентрации вещества в растворе.

Если для данного раствора соблюдается закон Бугера-Ламберта-Бера., то концентрация вещества в растворе может

быть определена из значения оптической плотности раствора по формуле:

$$C = D_v / \epsilon_v \cdot l$$

Для однокомпонентных растворов рекомендуется использовать значения D_v и ϵ_v , соответствующие частоте максимума наиболее интенсивной полосы в спектре поглощения растворенного вещества. Это позволяет свести к минимуму ошибки, возникающие при измерении D за счет погрешности в определении ν . Кроме того, при расчёте концентрации вещества часто используют литературные значения ϵ , которые определяют в максимуме полосы поглощения.

Приборы и принадлежности: спектрофотометр "Specord UV VIS", набор прямоугольных кювет, водные растворы веществ $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ известной и неизвестной концентрации, растворитель, пипетки.

Порядок работы.

1. Настроить прибор и записать спектры поглощения растворов $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ известной концентрации.

2. Определить оптическую плотность $D_{\text{макс}}$ раствора соли в максимуме наиболее широкой полосы поглощения.

3. Исходя из закона Бугера-Ламберта-Бера определить коэффициент экстинкции $\epsilon_{\text{макс}}$ в данной точке спектра.

4. Измерить оптическую плотность $D_{\text{макс}}$ раствора того же вещества неизвестной концентрации при частоте максимума полосы поглощения.

5. Исходя из закона Бугера-Ламберта-Бера и найденных значений $D_{\text{макс}}$ и $\epsilon_{\text{макс}}$ определить искомую концентрацию вещества.

6. Результаты вычислений представить в виде таблицы:

Соль	Длина волны λ_k , нм	Коэффиц. экстинкции $\epsilon_i^{\lambda_k}$	Оптическ. плотность р-ра, D^{λ_k}	Концент. соли, м / л	Ошибка определ. %

Лабораторная работа № 4.

Количественный анализ многокомпонентных систем

Если раствор содержит n не взаимодействующих между собой компонентов, то оптическая плотность раствора определяется суммой оптических плотностей всех компонентов системы:

$$D^{\lambda_k} = \sum_{i=1}^n D_i^{\lambda_k}$$

где D^{λ_k} и $D_i^{\lambda_k}$ - оптические плотности смеси и i -го компонента соответственно при длине волны λ_k , или, учитывая закон Бугера-Ламберта-Бера:

где $\epsilon_i^{\lambda_k}$ - коэффициент экстинкции i -го компонента при длине волны λ_k , C_i - его концентрация.

Учитывая это, для количественного анализа n -компонентного раствора необходимо составить и решить систему из n уравнений:

$$D^{\lambda_1} = \epsilon_1^{\lambda_1} C_1 l + \epsilon_2^{\lambda_1} C_2 l + \dots + \epsilon_n^{\lambda_1} C_n l$$

$$D^{\lambda_2} = \epsilon_1^{\lambda_2} C_1 l + \epsilon_2^{\lambda_2} C_2 l + \dots + \epsilon_n^{\lambda_2} C_n l$$

$$\dots$$

$$D^{\lambda_n} = \epsilon_1^{\lambda_n} C_1 l + \epsilon_2^{\lambda_n} C_2 l + \dots + \epsilon_n^{\lambda_n} C_n l$$

При составлении этой системы уравнений выбирают значение рабочей длины волны i -го уравнения, соответствующее максимальному коэффициенту экстинкции i -го компонента при минимальном суммарном значении коэффициентов экстинкции всех остальных $n-1$ компонентов. Точность определения концентрации отдельных компонентов в растворе зависит от правильного выбора рабочих длин волн.

В настоящей работе предлагается определить концентрации индивидуальных соединений, входящих в состав n -компонентного раствора.

Приборы и принадлежности: спектрофотометр "Specord UV VIS", набор прямоугольных кювет, раствор, содержащий n не взаимодействующих между собой индивидуальных соединений, растворы индивидуальных соединений (водные растворы $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) известной концентрации, дистиллированная вода, пипетки.

Порядок работы.

1. Записать спектры поглощения водных растворов индивидуальных соединений $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ с известной концентрацией.
2. Измерить спектр n -компонентного раствора содержащего данные соединения.
3. Сравнивая между собой спектры индивидуальных соединений, выбрать n рабочих длин волн.

4. Для всех рабочих длин волн определить значения:
 - а) коэффициентов экстинкции индивидуальных соединений;
 - б) оптические плотности n -компонентного раствора.
5. Зная значения $\epsilon_i^{\lambda_k}$ и D^{λ_k} , составить систему уравнений и определить концентрации индивидуальных веществ, входящих в состав n -компонентного раствора.
6. При решении системы уравнений использовать данные приложения (см. Приложение II).
7. Экспериментальные данные внести в таблицу:

Компоненты раствора	Длина волны, λ_k , нм	Кoeffиц. экстинкции $\epsilon_i^{\lambda_k}$	Оптическ. плотность смеси, D^{λ_k}	Концентрация в-ва, м / л

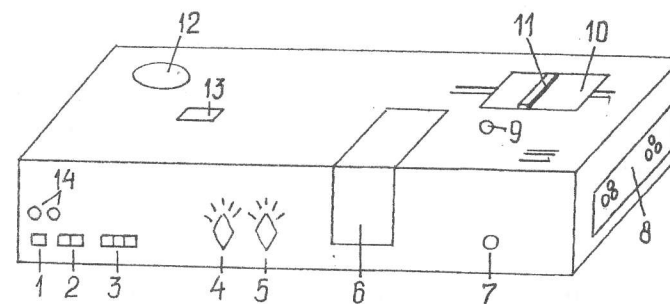
Вопросы для самоконтроля:

1. Чем обусловлено возникновение спектров поглощения в ультрафиолетовой, видимой и ближней инфракрасной областях спектра?
2. В каком интервале длин волн наблюдаются электронные спектры?
3. Какие типы электронных переходов наблюдаются при поглощении веществом УФ и видимого излучения?
4. Параметры УФ-спектра
5. Закон Бугера-Ламберта-Бера.
6. Дать определение хромофору и ауксохрому.
7. Классификация полос поглощения в УФ-спектре.

8. Какую терминологию используют для характеристики спектральных изменений, вызванных модификацией структуры?
9. Правило Вудворда.
10. Принципиальная схема спектрофотометра.
11. Какие прикладные задачи могут быть решены с помощью УФ спектроскопии?

Практические работы по инфракрасным спектрам поглощения.

Общий вид спектрофотометра "Specord - 71 IR"



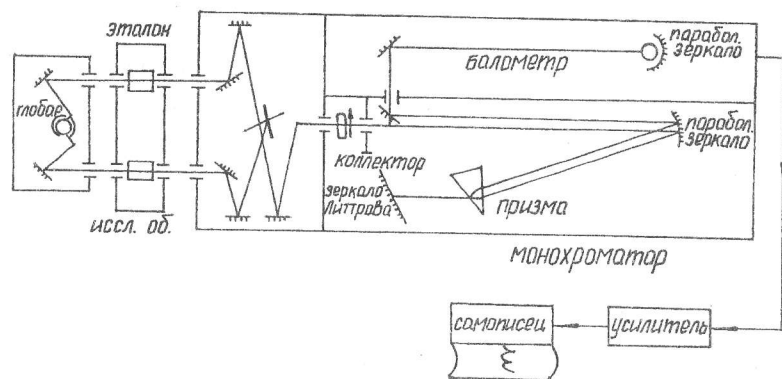
1. Тумблер "сеть"
2. Кнопки "быстро вперед" и "быстро назад"
3. Кнопки "стоп возврат", "пуск", "стоп"
4. Регулятор спектральной щели
5. Регулятор усиления
6. Камера образцов
7. Регулятор напряжения на глобаре
8. Блок шестеренок, управляющих скоростью и масштабом сканирования
9. Кнопка движения каретки

10. Каретка
11. Перо самописца
12. Осушительный патрон
13. Шкала волновых чисел
14. Сигнальные лампочки

Принцип работы спектрофотометра "Specord - 71 IR"

Спектрометр "Specord - 71 IR" является двухлучевым сканирующим спектральным прибором. Спектрофотометр состоит из: блока источника излучения; блока, разделяющего излучения на два когерентных пучка; прерывателя, генерирующего поперечное прохождение обоих пучков через монохроматор; блока монохроматора, разлагающего полихроматический свет на монохроматические составляющие (непрерывные), приемника излучения, работающего в фазе с прерывателем; усилителя сигнала приемника и, наконец, самописца, фиксирующего сигнал на диаграммной бумаге.

Принципиальная схема двухлучевого сканирующего спектрофотометра.



При работе спектрофотометра полихроматическое излучение попадает на зеркала, разделяющие его на два когерентных пучка, один из которых проходит через эталонный (сравнительный), а другой – через исследуемый образец. Затем оба пучка объединяются прерывателем, генерирующим постоянные попеременные чередования хода сравнительного и измеряемого пучка излучений и направляет их через систему линз и щелей в монохроматор, где происходит разделение полихроматического излучения. Высокая монохроматичность достигается двукратным прохождением излучения через разлагающую солевую призму. Для излучения в области $4600-1800 \text{ см}^{-1}$ применяются призмы из LiF, для области $2600-650 \text{ см}^{-1}$ - призма из NaCl и для области $680-400 \text{ см}^{-1}$ - призма из KBr. Скорость разверстки спектра управляется поворотом зеркала Литтрова. Монохроматическое излучение через систему зеркал попадает на приемник излучения – балометр, представляющий собой термодиод. Сигнал балометра находится в фазе с прерывателем и представляет собой разницу в интенсивности электромагнитного излучения пучков, прошедших через исследуемый эталонный образец. Дифференцированный сигнал усиливается усилителем и подается на самописец, который фиксирует измеренную величину I_0 / I_x как функцию от волнового числа, времени, температуры, либо другого измеряемого параметра.

Порядок работы на спектрофотометре "Specord - 71 IR"

Внимание: сетевой размер прибора должен быть подключен к сети круглосуточно!

1. Включить прибор кнопкой «сеть».

2. Вывернуть осушительные патроны и заглушки в камере образцов (6)
3. Кнопками «быстро вперед» и «быстро назад» установить начальное волновое число. (Сканирование происходит в сторону меньших частот).
4. Установить каретку в начальное положение (крайнее правое).
5. Наложить диаграммную бумагу и вставить перо в держатель самописца (11).
6. Установить щель – 1,5 и усиление – 6.
7. Поместить исследуемый образец в камеру с кнопкой «пуск» включить запись ИК-спектра.

Лабораторная работа №1.

Градуировка ИК-спектрометра по волновым числам при помощи спектров эталонов.

Градуировка спектрофотометра по волновым числам заключается в установлении соответствия между показаниями шкалы прибора и волновым числом проходящего через образец инфракрасного излучения. Для градуировки удобно использовать спектры поглощения индивидуальных веществ, волновые числа максимумов полос которых известны с высокой точностью. Спектры этих веществ должны содержать достаточное количество узких полос. Этим требованиям удовлетворяют спектры некоторых жидкостей (HCl, HBr, CO, H₂O, NH₃) и твердых пленок.

Для градуировки инфракрасных спектрофотометров, работающих в интервале 700-4000 см⁻¹, применяют пленку полистирола толщиной 25 мкм, которая имеет характерные полосы поглощения в интервале 3100-2800 см⁻¹ и 2000-700 см⁻¹

(см. рис.), газообразный аммиак в слое 10 см при давлении 200 мм. рт. ст., поглощающий в области 3500-3100 см⁻¹ и 1250-700 см⁻¹ пары HCl (3100-2600 см⁻¹), HBr (2600-2400 см⁻¹), и CO (2200-2000 см⁻¹). Для градуировке приборов, работающих по однолучевой схеме, в этой области спектра можно использовать поглощение паров воды и углекислого газа, содержащегося в атмосферном воздухе.

Для градуировки приборов в области 4000-1500 см⁻¹ используют жидкие бензол и хлороформ в слое 1 см, в области 700-400 см⁻¹ – жидкий 1,2,4-трихлорбензол в слое 0,1 см.

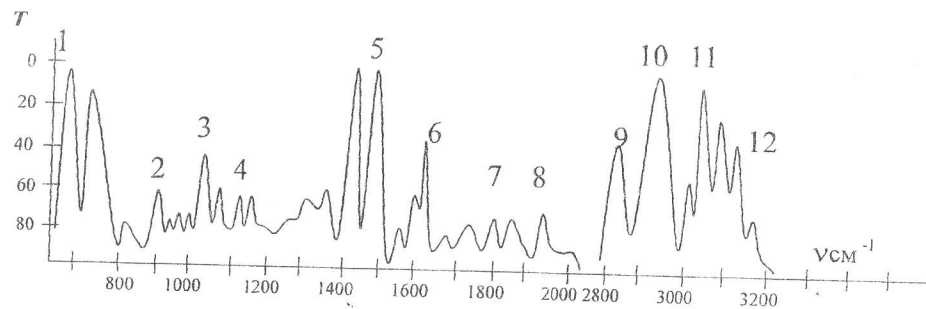
Приборы и принадлежности: спектрофотометр "Specord-71 IR", пленка полистирола в держателе, миллиметровая бумага.

Порядок работы.

1. Установить на приборе усиление 3 и ширину щели 2 мм.
2. На пути исследуемого луча установить пленку полистирола в держателе.
3. Установить на каретке лист бумаги и совместить риски контроля.
4. Записать спектр поглощения образца и отметить положения максимумов полос в полученном спектре поглощения полистирола $\nu_{\text{макс}}$ (изм).
5. Сравнить положение максимумов основных полос поглощения полученного спектра полистирола с эталонным.

Спектр поглощения плёнки полистирола

1 - 699	4 - 1155	7 - 1802	10 - 2925 см ⁻¹
2 - 907	5 - 1494	8 - 1946	11 - 3028 см ⁻¹
3 - 1028	6 - 1602	9 - 2851	12 - 3083 см ⁻¹



6. Заполнить таблицу:

№ полосы	Частота, $\nu_{\text{макс}}$ см. ⁻¹		Функцион. группа
	Эталон	Эксперим.	

7. Построить на миллиметровой бумаге градуировочный график, связывающий истинные (эталонные) значения $\nu_{\text{макс}}$ с показаниями прибора $\nu_{\text{макс}}$.

Лабораторная работа №2

Измерение инфракрасных спектров жидкостей

Известно, что современные методы ИК-спектроскопии позволяют получать спектры образцов, находящихся в любом из трех агрегатных состояний – газообразном, жидком и твердом. Однако на практике приходится иметь дело с образцами, представляющими собой жидкости или растворы.

При съемках ИК-спектров жидкостей и растворов используются преимущественно два типа кювет – кюветы постоянной толщины и разборные. Для целей количественного анализа предпочтительней применять кюветы с постоянной

толщиной слоя, для целей качественного анализа – разборные кюветы.

В работе предлагается измерить ИК-спектр жидкого органического вещества в широком интервале длин волн.

Приборы и принадлежности: спектрофотометр "Specord IR", пленка полистирола, две разборные кюветы, держатель для кювет, прокладки, пипетки, исследуемое вещество.

Порядок работы.

1. Проградуировать спектрофотометр, используя пленку полистирола (см. лабораторную работу №1).
2. Поместить каплю исследуемой жидкости (ацетон, гексан, др.) между двумя окошками разборной кюветы, закрепить их в держателе и установить в рабочем канале спектрофотометра.
3. Закрепить в держателе одно из окошек разборной кюветы и поместить его в канал сравнения.
4. Записать спектр исследуемой жидкости в широком интервале волновых чисел.
5. Используя таблицу характеристических частот (см. Приложение III) сделать отнесение полос к колебаниям соответствующих функциональных групп и связей.
6. Заполнить таблицу:

№ полосы	Частота, $\nu_{\text{макс}}$ см. ⁻¹	Функцион. группа

Лабораторная работа №3

Измерение инфракрасных спектров растворов.

Приборы и принадлежности: спектрофотометр "Specord IR", пленка полистирола, две разборные кюветы, держатель, хлороформ марки "х.ч.", исследуемое вещество.

Порядок работы.

1. Проградуировать спектрофотометр, используя пленку полистирола (см. лабораторную работу №1).
2. Приготовить несколько образцов (нитростирол, ацетофенон или любое другое соединение с полярной функциональной группой). Для этого взять навеску (100мг) и растворить её в 2,5 мл хлороформа.
3. Собрать две кюветы с произвольно выбранной (но одинаковой) толщиной слоя и заполнить одну из них растворителем, а другую - раствором.
4. Поместить кюветы в соответствующие каналы спектрофотометра и провести ориентировочную оценку оптической плотности раствора (максимум самой интенсивной полосы поглощения в спектре не должен превышать 20% пропускания).
5. Если оптическая плотность раствора не удовлетворяет оптимальным условиям съемки, следует изменить (увеличить или уменьшить) первоначально выбранную толщину слоя и повторить операции 2 и 3.
6. Найдя опытным путем оптимальную толщину слоя раствора, записать его спектр в области 4000-650 см.⁻¹.
7. На основании табличных данных (см. Приложение III) дать интерпретацию наиболее интенсивных полос спектра и заполнить таблицу:

№ полосы	Частота, $\nu_{\text{макс}}$ см. ⁻¹	Функцион. группа

Лабораторная работа №4

Измерение инфракрасных спектров твердых веществ.

Существует ряд методов, предназначенных для измерения ИК-спектров твердых веществ, нерастворимых в органических растворителях. Среди них особенно широкое значение получила методика приготовления суспензий (паст, взвесей) в масле. Она сравнительно проста, достаточно надежна и, как правило, может быть использована для измерения ИК-спектров любых твердых веществ.

Обычно для приготовления пасты используют смесь жидких высокомолекулярных парафиновых углеводородов. Естественно, что минеральное масло не должно обладать в исследуемой ИК-области спектра собственным поглощением. Обычно для приготовления суспензий используется вазелиновое масло. Оно прозрачно в широком спектральном диапазоне: 5000-3100 см.⁻¹, 2700-1500 см.⁻¹, 1300-700 см.⁻¹ и даёт полосы в областях 3030-2860 (валентные колебания С-Н), 1460, 1375 см.⁻¹ (деформационные колебания С-Н). Следовательно, если для приготовления паст используют вазелиновое масло, то данных о поглощении в этой области получить нельзя. Вместо него можно применить гексахлорбутadiен: у него нет связей С-Н и, следовательно он прозрачен в области 4000-2000 и 1500-1000 см.⁻¹. Для снятия спектров можно использовать различные твердые вещества (ацетанилид, *n*-нитроацетанилид, бензойная кислота, *m*-нитробензойная кислота и др.).

Приборы и принадлежности: спектрофотометр "Specord IR", аналитические весы, пленка полистирола, две разборные кюветы, держатели, прокладки, пипетки, агатовая ступка с пестиком, шпатель, вазелиновое масло, исследуемое твердое вещество.

Порядок работы.

1. Проградуировать спектрофотометр по полистиролу (см. лабораторную работу №1).
2. Приготовить суспензию (тщательно растереть в агатовой ступке 50 мг исследуемого вещества с 5 каплями вазелинового масла).
3. Нанести тонкий слой на одно из окошек разборной кюветы, закрыть его сверху другим окошком, закрепить оба окошка в держателе и установить в рабочем канале спектрофотометра.
4. Поместить несколько капель вазелинового масла между двумя окошками разборной кюветы, закрепить окошки в держателе и установить в окошке сравнения.
5. Записать спектр исследуемого вещества в широком интервале длин волн.
6. Переставить кювету из канала сравнения в рабочий канал и снять спектр масла (в канале сравнения поставить держатель с окнами без масла).
7. В спектре исследуемого вещества отметить полосы, относящиеся к маслу.
8. На основании табличных данных (см. Приложение III) сделать наиболее полное отнесение полос поглощения исследуемого органического веществ.
9. Данные по расшифровки спектра внесите в таблицу:

№ полосы	Частота, $\nu_{\text{макс}} \text{ см.}^{-1}$	Функцион. группа

Вопросы для самоконтроля:

1. Какие методы называются спектральными?
2. Какие агрегатные состояния вещества можно исследовать с помощью ИК-спектроскопии?
3. Что является причиной характеристичности полос в ИК - спектрах?
4. В каком интервале частот снимают инфракрасные спектры?
5. Какие колебания называются валентными, деформационными?
6. Назовите область валентных и деформационных колебаний.
7. Параметры ИК-спектра, оптимальные условия съёмки.
8. Какие сведения могут быть получены из ИК-спектра?
9. Дать определение формальной неопределённости вещества (ФН).
10. Какая дополнительная информация необходима для надёжной интерпретации ИК-спектров?

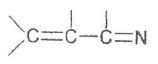

Приложение I
Характеристика простых хромофорных групп
(по Дайеру, 1970)

Хромофорная группа	Соединение	λ_{\max} , рэ	ϵ_{\max} л/(моль·см)	Растворитель
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{C} \diagdown \\ -\text{C}\equiv\text{C}- \end{array}$	Этилен Октин-2	171	15530	Пары
		178	10000	н-Гептан
		196	2100	"
		223	160	"
$\diagup \text{C}=\text{O}$	Ацетальдегид	160	20000	Пары
		180	0000	"
		290	17	"
$\diagup \text{C}=\text{O}$	Ацетон	166	16000	"
		189	900	н-Гексан
		279	15	"
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{O} \\ \text{OH} \end{array}$	Уксусная кислота	208	32	Этанол
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{O} \\ \text{Cl} \end{array}$	Хлористый ацетил	220	100	н-Гексан
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{O} \\ \text{NH}_2 \end{array}$	Ацетамид	178	9500	"
		220	63	Вода
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{O} \\ \text{O} \end{array}$	Этилацетат	221	57	Этанол
-NO ₂	Нитрометан	201	5000	Метанол
		274	17	"
-ONO ₂	Бутилнитрат	270	17	Этанол

Продолжение таблицы

Хромофорная группа	Соединение	λ_{\max} , рэ	ϵ_{\max} л/(моль·см)	Растворитель
-ONO	Бутилнитрит	220	14500	н-Гексан
		356	87	"
-NO	Нитрозобутан	300	100	Эфир
		665	20	"
$\diagup \text{C}=\text{N}-$	Ацетоксим	190	500	Вода
-C≡N	Ацетонитрил	167	—	Пары
$\begin{array}{c} + \\ \diagup \text{C}=\text{N}=\text{N} \end{array}$	Диазоуксусный эфир	249	10050	Этанол
		378	16	"
-N=N-	Азотетан	338	4	"
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C} \diagdown \\ \quad \end{array}$	Бутадиен	217	20900	н-Гексан
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}- \\ \end{array}$	Винилацетилен	219	7600	"
		228	7800	"
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{O} \\ \end{array}$	Кротоновый альдегид	218	18000	Этанол
		320	30	"
-C≡C-C=O	Гексин-1-он-3	214	4500	"
		308	20	"
$\begin{array}{c} \diagup \text{C}=\text{C}-\text{COOH} \\ \end{array}$	цис-Кротоновая кислота	206	13600	"
		242	250	"
		219	25000	н-Гексан

Продолжение таблицы

Хромофорная группа	Соединение	λ_{max} , нм	ϵ_{max} , л/(моль·см)	Растворитель
	N-н-бутилимин кротонового альдегида	215	680	Этанол
	Бензол	184 204 256	6000 7900 200	Циклогексан " "

Приложение II

Решение системы условных уравнений методом наименьших квадратов

Если в результате эксперимента данные можно записать в виде системы уравнений

$$\begin{aligned} a_1x + b_1y + \dots + c_1z &= d_1 \\ a_2x + b_2y + \dots + c_2z &= d_2 \\ \dots & \\ a_mx + b_my + \dots + c_mz &= d_m \end{aligned}$$

где a, b, \dots, c – параметры, d – измеряемые величины, x, y, \dots, z – искомые неизвестные, и число уравнений превышает число неизвестных, то такая системы несовместна. Но можно найти наиболее вероятные значения неизвестных, квадратичная ошибка которых минимальна, используя метод наименьших квадратов.

Наиболее вероятные значения неизвестных x, y, \dots, z

получаются при решении системы уравнений, где число уравнений равно числу неизвестных

$$[aa]x + [ab]y + \dots + [ac]z = [ad]$$

$$[ba]x + [bb]y + \dots + [bc]z = [bd]$$

$$[ca]x + [ca]y + \dots + [ca]z = [cd]$$

Здесь

$$[aa] = a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_m^2$$

$$[ab] = a_1b_1 + a_2b_2 + \dots + a_mb_m$$

$$[bd] = b_1d_1 + b_2d_2 + \dots + b_md_m$$

В частном случае пяти уравнений с двумя неизвестными имеем систему

$$a_1x + b_1y = d_1$$

$$a_2x + b_2y = d_2$$

$$a_3x + b_3y = d_3$$

$$a_4x + b_4y = d_4$$

$$a_5x + b_5y = d_5$$

Вводя величины

$$[aa] = a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 + a_5^2$$

$$[ab] = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 + a_4b_4 + a_5b_5 = [ba]$$

$$[bb] = b_1^2 + b_2^2 + b_3^2 + b_4^2 + b_5^2$$

$$[ad] = a_1d_1 + a_2d_2 + a_3d_3 + a_4d_4 + a_5d_5 = [da]$$

$$[bd] = b_1d_1 + b_2d_2 + b_3d_3 + b_4d_4 + b_5d_5 = [db],$$

составляем схему их двух уравнений с двумя неизвестными

$$[aa]x + [ab]y = [ad]$$

$$[ba]x + [bb]y = [bd],$$

решение которой дает наиболее вероятные значения x и y .

$$x = \frac{[ad][bb] - [ad][bd]}{[aa][bb] - [ab][bd]}$$

$$y = \frac{[aa][bd] - [ba][ad]}{[aa][bb] - [ab][bd]}$$

Приложение III.
Характеристичные колебательные частоты
функциональных групп

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность * ИК (КРС)
УГЛЕВОДОРОДЫ		
Валентные колебания С—Н		
Алканы	2962-2853	с-ср (10)
Алкены		
монозамещенные	3040-3010	ср
	3095-3075	ср
дизамещенные		
цис-	3040-3010	ср
транс-	3040-3010	ср
гем-	3095-3075	ср (3)
тризамещенные	3040-3010	ср (1)
Алкины	3300	с (1)
Ароматические	3060	пер (8-12)

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
Деформационные колебания С—Н		
Алканы		
СН	1340	сл
СН ₂	1485-1445	ср
СН ₃	1470-1430	ср (10)
	1380-1370	с
гем-диметил	1385-1380	с
	1370-1365	с
трет-бутил	1395-1385	ср
	1365	с
Алкены		
монозамещенные	995-985	с
	915-905	с
	1420-1410	с
дизамещенные		
цис-	690	
транс-	970-960	с
	1310-1295	ср
гем-	895-885	с
	1420-1410	с(4)

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
тризамещённые	840-790	с
Алкины	630	с
Ароматические*		
тип замещения:		
пять смежных атомов Н	750	пер, с
	700	пер, с
четыре	750	пер, с
три	780	пер, ср
два	830	пер, ср
один атом Н	880	пер, сл
Валентные колебания кратных связей С—С		
Алкены		
несопряженные*	1680-160	пер
монозамещенные	1645	ср (7)
дизамещенные		
цис-	1645	ср (8)
транс-	1675	ср (8)
гем-	1655	ср (7)
тризамещенные	1670	ср
тетразамещенные	1670	сл (6)
сопряженные	1650	сл (10)
Алкины	1600	сл
монозамещенные	2140-2100	сл (6)

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя; сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
дизамещенные	2260-2190	пер, сл (5)
Алкены	1950	сл (0)
	1060	сл (20)
Арены	1600	пер (4)
	1580	пер (2)
	1500	ср
	1450	ср (8)
	1030	— (8)
	1000	— (12)
КАРБОНИЛЬНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ		
Валентные колебания С=О		
Кетоны		
насыщенные ациклические	1725-1705	с (3)
насыщенные циклические		
6-членные и больше	1725-1705	с
5-членные	1750-1740	с
4-членные	1775	с
α,β-ненасыщенные	1685-1665	с (14)
ациклические		
α,β-ненасыщенные		
циклические		
6-членные и больше	1685-1665	с

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя; сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
5-членные Альдегиды	1724-1708	с
насыщенные алифатические	1740-1720	с (3)
α,β-ненасыщенные алифатические	1705-1680	с
α,β,γ,δ-ненасыщенные алифатические	1680-1660	с
ароматические	1715-1695	с
Сложные эфиры		
насыщенные ациклические	1750-1735	с (3)
насыщенные циклические		
δ-лактоны	1750-1735	с
β-лактоны	1820	с
γ-лактоны	1780-1760	с
ненасыщенные		
тип виниловых эфиров	1800-1770	с
α,β-ненасыщенные и арильные	1730-1717	с
α,β-ненасыщенные δ-лактоны	1730-1717	с

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
α,β-ненасыщенные γ-лактоны	1760-1740	с
β, γ-ненасыщенные γ-лактоны	1880	с
α-кетозфиры	1755-1740	с
β-кетозфиры (энольные)	1650	с
насыщенные алифатические	1725-1700	с(4)
α,β-ненасыщенные алифатические	1715-1690	с
ароматические	1700-1680	с
Ангидриды		
насыщенные циклические	1850-1800	с
	1790-1740	с
α,β-ненасыщенные и ароматические ациклические	1830-1780	с
насыщенные 5-членные циклы	1770-1720	с
	1870-1820	с
	1800-1750	с
α,β-ненасыщенные 5-членные циклы	1850-1800	с
	1830-1780	с
Галогенангидриды		

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
фторангидриды	1850	с
хлорангидриды	1795	с
бромангидриды	1810	с
α,β-ненасыщенные и ароматические	1780-1750	с
Амиды первичные	1750-1720	с
твердые или конц. растворы	1650	с(3)
разбавленные растворы вторичные	1690	с
твердые или конц. растворы	1680-1630	с
разбавленные растворы третичные	1700-1670	с
твердые или в растворе	1670-1630	с
Валентные колебания С—Н		
Альдегиды	2900-2820	сл
	2775-2700	сл
Валентные колебания О—Н		
Карбоновые кислоты	2700-2500	сл

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
Валентные колебания N—H		
Амиды первичная группа свободная	3500	ср
	3400	ср
Связанная	3350	ср
	3180	ср
Вторичная группа свободная	3430	ср
	связанная	3320-3140
Деформационные колебания N—H		
Амиды первичные (разбавленные растворы)	1620-1590	с
	вторичные (разбавленные растворы)	1550-1510
Валентные колебания С—О		
Сложные эфиры ацетаты	1060-1000	сл
	1247-1236	с
формиаты	1200-1180	с
	1161-1152	ср

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
пропионаты и высшие гомологи	1200-1163	с
α,β-ненасыщенные	1310-1250	с
	1200-1100	с
ГИДРОКСИЛСОДЕРЖАЩИЕ СОЕДИНЕНИЯ Валентные колебания O—H		
Спирты		
свободные группы O—H	3650-3590	пер, у
связанные межмолекулярной H связью с 1 мостиком	3550-3450	пер, у
Полимерная ассоциация связанные внутримолекулярной H-связью с 1 мостиком хелатные соединения	3400-3200	с, ш
	3570-3450	пер, у
	3200-2500	сл, у
Деформационные колебания O—H Валентные колебания C—O		
Спирты		
Первичные	1050	с(б)
	1350-1260	с

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
вторичные	1100	с
	1350-1260	с
третичные	1150	с
	1410-1310	с
фенолы	1200	с
	1410-1310	с
АЗОТСОДЕРЖАЩИЕ СОЕДИНЕНИЯ Валентные колебания N—H		
Амины		
первичные свободные	3500	ср (4)
	3400	ср
вторичные свободные	3500-3310	ср (2)
Имины	3400-3300	ср
Соли аминов	3130-3030	ср
Деформационные колебания N—H		
Амины		
первичные	1650-1590	с-ср
вторичные	1650-1550	сл
Соли аминов	1600-1575	с
	1500	с
Валентные колебания C—N		
Амины		

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
ароматические		
первичные	1340-1250	с(7)
вторичные	1350-1280	с
третичные	1360-1310	с
алифатические	1220-1020	сл(7)
	1410	сл
Валентные колебания C≡N		
Алкилнитрилы		
насыщенные	2260-2240	ср(10)
α,β-ненасыщенные	2235-2215	ср
Арилнитрилы*	2240-2220	ср
Изоцианаты	2275-2240	ср
Изоцианиды	2240-2070	ср
Валентные колебания C=N		
Алкильные производные		
иминов и оксимов	1690-1640	пер (2-8)
α,β-ненасыщенных соединений	1660-1630	пер
Валентные колебания N=N		
Азосоединения	1630-1575	пер (4)
Колебания C—NO ₂		
Нитросоединения		

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Продолжение таблицы

Соединения и группы	Диапазон волновых чисел, см ⁻¹	Интенсивность ИК (КРС)
ароматические	1570-1500	с(5)
	1370-1300	с(100)
алифатические	1570-1550	с(5)
	1380-1370	с(8)
СОЕДИНЕНИЯ, СОДЕРЖАЩИЕ S		
Валентные колебания S—H		
	2600-2550	сл(6)
Валентные колебания C—S		
	1200-1050	с
Валентные колебания S=O		
Сульфоксиды	1070-1030	с
Сульфоны	1160-1140	с
	1350-1300	с
Сульфонамиды	1180-1140	с
	1350-1300	с
Сульфоновые кислоты	1210-1150	с
	1060-1030	с
	650	с

*Интенсивность ИК: с- сильная; ср – средняя, сл – слабая; пер – переменная; у – узкая; ш – широкая

Список цитируемой и рекомендуемой литературы

1. Р. Драго, Физические методы в химии. М.: Мир, Т.1. 1981.
2. Б.В. Иоффе, Р.Р. Костиков, В.В. Разин, Физические методы определения строения органических соединений. Уч. пособие для хим. вузов / Под ред. Иоффе Б.В. - М.: Выс. шк., 1984.
3. Л.В. Вилков, Ю.А. Пентин, Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы. М.: Высш. шк. 1989.
4. Л.А. Казицына, Н.Б. Куплетская, Применение УФ-, ИК-, ЯМР- и масс-спектропии в органической химии. М.: Изд-во Моск. Ун-т; 1979.
5. Г.В. Сайдов, О.В. Свердлова, Практическое руководство по молекулярной спектроскопии: Уч пособие / Под ред. Бахшиева Н.Г. - Л.: Изд-во Ленингр. ун-т, 1980.
6. В.М. Пешков, М.И. Громова, Методы адсорбционной спектроскопии в аналитической химии. М.: Высшая школа, 1976.
7. Т. Юнг, Инструментальные методы химического анализа. М.: Мир. 1989.
8. К. Бенуэл. Основы молекулярной спектроскопии. М.: Мир. 1985.
9. В.И. Тюлин. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: Изд-во МГУ. 1987.