

УДК 542.8+544

ББК 24.51

М80

Печатается по решению кафедры физической и коллоидной химии им. В. А. Когана химического факультета Южного федерального университета (протокол № 4 от 18 марта 2022 г.)

Рецензенты:

заведующий кафедрой аналитической химии ЮФУ, д.х.н.,

профессор *И. Е. Уфлянд*;

старший научный сотрудник Южного научного центра АН РФ,

к.х.н. *С. И. Левченков*

Морозов, А. Н.

М80 Интерпретация данных физических методов при исследовании молекул : учебное пособие / А. Н. Морозов., В. В. Луков ; Южный федеральный университет. – Ростов-на-Дону ; Таганрог : Издательство Южного федерального университета, 2022. – 146 с.

ISBN 978-5-9275-4060-0

В пособии рассмотрены вопросы применения основных физических методов исследования структуры органических молекул: метод дипольных моментов методы ИК, УФ, масс- и ЯМР-спектроскопии. Приведены способы решения типовых упражнений, задач повышенной сложности, а также контрольные задания для самостоятельного решения. Пособие содержит также задания, рассчитанные на комплексное применение нескольких методов и основанные на сочетании эмульгированных и реальных экспериментальных данных.

Предназначено для студентов, аспирантов и преподавателей химических факультетов университетов.

Публикуется в авторской редакции.

УДК 542.8+544

ISBN 978-5-9275-4060-0

ББК 24.51

© Южный федеральный университет, 2022

© Морозов А. Н., Луков В. В., 2022

© Морозов А. Н., 2022, дизайн, макет

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	3
Глава I. МЕТОД ДИПОЛЬНЫХ МОМЕНТОВ	4
I.1. Расчетный аппарат метода дипольных моментов	5
I.2. Применение метода дипольных моментов	8
I.2.1 Молекулы, существующие в виде равновесной смеси нескольких форм	8
I.2.2. Расчет дипольного момента молекул, содержащих произвольное число вращающихся полярных групп	13
I.2.3. Задачи повышенной сложности.....	16
I.3. Задачи для самостоятельного решения	32
Глава II. МЕТОД ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ	33
II.1. Химический сдвиг и стереохимия	34
II.2. Упражнения	39
II.3. Примеры идентификации строения соединений по данным ЯМР спектроскопии (задачи с решением)	40
II.4. Задачи для самостоятельного решения	46
II.5. Примеры задач на построение спектра ЯМР и нахождение спектральных параметров	48
II.6. Задачи для самостоятельного решения	59
Глава III. МЕТОД ИНФРАКРАСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	62
III.1. Общие замечания	63
III.2. Отнесение структуры в соответствии с данными ИК спектров	64
III.3. Примеры реальных ИК спектров органических соединений	66
III.4. Задачи для самостоятельного решения	69
Глава IV. МЕТОД ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	72
IV.1. Задачи, решаемые методом УФ спектроскопии	73
IV.2. Задачи для самостоятельного решения	75
Глава V. МЕТОД МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ	78
V.1. Некоторые правила и последовательность выполнения интерпретации масс-спектров	79
V.2. Примеры решения задач	83
V.3. Задачи для самостоятельного решения	100
V.4. Ответы к задачам по масс-спектроскопии.....	110
Глава VI. КОМПЛЕКСНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ	112
VI.1. Комплексное применение спектральных методов	113
VI.2. Примеры решения комплексных задач	116
VI.3. Задачи для самостоятельного решения	126
VI.4. Ответы к комплексным задачам	136
Приложения	137
Литература	142