

УДК 547.543.51(075.8)
ББК 24.2:24.5я73
К78

Краснокутская Е.А.
К78 Спектральные методы исследования в органической химии: учебное пособие. Часть II. ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия / Е.А. Краснокутская, В.Д. Филимонов – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2013. – 88 с.

ЯМР-спектроскопия и масс-спектрометрия являются одними из наиболее информативных методов для установления структуры органических молекул. Кроме того, они находят широкое применение в количественном анализе органических субстратов. В пособии представлен материал, включающий краткое рассмотрение теоретических основ методов ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии, особенностей интерпретации аналитических результатов. Приведены примеры установления структур органических молекул с использованием указанных методов.

Предназначено для подготовки магистров и бакалавров направлений 2407100 «Химическая технология», 240100 «Биотехнология».

УДК 547.543.51(075.8)
ББК 24.2:24.5я73

Рецензенты

Доктор химических наук, профессор кафедры химии нефти
и высокомолекулярных соединений и нефтехимии ТГУ

А.Г. Филимошкин

Доктор химических наук, профессор заведующий кафедрой
органической химии ТГПУ

О.Х. Полещук

© ФГБОУ ВПО НИ ТПУ, 2013

© Краснокутская Е.А.,
Филимонов В.Д., 2013

© Оформление. Издательство Томского
политехнического университета, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Глава 1. СПЕКТРОСКОПИЯ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА	4
1.1. Явление ядерного магнитного резонанса	4
1.2. Протонный магнитный резонанс (ПМР), или ЯМР ^1H	6
1.2.1. Химический сдвиг	8
1.2.2. Спин-спиновое взаимодействие	14
1.2.3. Константа спин-спинового взаимодействия	19
1.2.4. Интенсивность сигнала	22
1.2.5. Интерпретация спектров протонного магнитного резонанса	23
1.2.6. Классификация спиновых систем	26
1.2.7. Подавление спин-спинового взаимодействия (упрощение сложных спектров)	29
1.2.8. Химический обмен	31
1.2.9. Конформационный обмен	32
1.3. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса ядер ^{13}C	33
1.3.1. Основные особенности спектроскопии на ядрах ^{13}C	33
1.3.2. Общие правила для интерпретации спектров ^{13}C	36
Глава 2. МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЯ	46
2.1. Масс-спектры с ионизацией электронным ударом	47
2.2. Интерпретация масс-спектров с ионизацией ЭУ	52
2.2.1. Идентификация пика молекулярного иона	53
2.2.2. Фрагментация и перегруппировки	55
2.2.3. Общая характеристика масс-спектров классов органических соединений	60
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	87