

Б.Е. Зайцев, О.В. Ковальчукова, С.Б. Страшнова

ПРИМЕНЕНИЕ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ В ХИМИИ

Конспект лекций

**Москва
Российский университет дружбы народов
2008**

ББК 24
3-12

Утверждено
РИС Ученого совета
Российского университета
дружбы народов

Рецензент:
доктор химических наук, профессор *К.И. Кобраков*

Зайцев Б.Е., Ковальчукова О.В., Страшнова С.Б.
3-12 Применение ИК-спектроскопии в химии: Конспект лекций. – М.: РУДН, 2008. – 150 с.

ISBN 978-5-209-03292-2

Цель пособия – помочь студентам в освоении теоретических основ ИК-спектроскопии и применении этих знаний на практике.

Предназначено для магистров факультета физико-математических и естественных наук направлений: «Неорганическая химия», «Органическая химия» и «Химия окружающей среды».

Конспект лекций может быть также рекомендован аспирантам, научным сотрудникам и преподавателям, специализирующимся в различных областях химии.

ISBN 978-5-209-03292-2

ББК 24

© Зайцев Б.Е., Ковальчукова О.В., Страшнова С.Б., 2008
© Российский университет дружбы народов, Издательство, 2008

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
ГЛАВА 1. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ..	5
1.1. ЭЛЕМЕНТАРНАЯ МЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОЛЕБАНИЯ ДВУХАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЫ.....	5
1.2. НОРМАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ МОЛЕКУЛ.....	8
1.3. ОСНОВЫ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ.....	10
1.4. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ МОЛЕКУЛ.....	16
1.5. СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ.....	30
1.6. ПРАВИЛА ОТБОРА В ИК И КР СПЕКТРА.....	32
ГЛАВА 2. ОСНОВЫ ПРИМЕНЕНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В ХИМИИ	35
2.1. ФИЗИЧЕСКИЙ СМЫСЛ ПАРАМЕТРОВ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ.....	36
2.2. ХАРАКТЕРИСТИЧНОСТЬ ПАРАМЕТРОВ В ИК СПЕКТРАХ...	40
2.3. ВЛИЯНИЕ ВНУТРЕННЕГО СТРОЕНИЯ НА ПАРАМЕТРЫ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ.....	43
2.4. ВЛИЯНИЕ ОКРУЖЕНИЯ НА ПАРАМЕТРЫ ИК СПЕКТРОВ..	53
2.5. ВЛИЯНИЕ АГРЕГАТНОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА НА КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ИК СПЕКТРОВ.....	62
2.6. КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕЩЕСТВА.....	63
ГЛАВА 3 КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ НЕКОТОРЫХ КЛАССОВ СОЕДИНЕНИЙ	74
3.1. НЕКОТОРЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ ПАРАМЕТР-СВОЙСТВО ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ..	74
3.2. ХАРАКТЕРИСТИЧНЫЕ КОЛЕБАНИЯ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ И ИОНОВ.....	96
3.3. ПРИМЕНЕНИЕ ИК СПЕКТРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	112
ГЛАВА 4 РЕШЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ В ХИМИИ МЕТОДОМ ИК СПЕКТРОСКОПИИ	126
4.1. ИЗУЧЕНИЕ ТАУТОМЕРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ.....	126
4.2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЦЕНТРА ПРОТОНИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛ....	131
4.3. ОБРАЗОВАНИЕ КООРДИНАЦИОННЫХ СВЯЗЕЙ.....	135
4.4. СТЕРИЧЕСКИЕ ПРЕПЯТСТВИЯ.....	136
4.5. ВВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ ВОДОРОДНАЯ СВЯЗЬ.....	139
4.6. ВЛИЯНИЕ АГРЕГАТНОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА.....	144
4.7. ОЦЕНКА СТЕПЕНИ КОВАЛЕНТНОСТИ КООРДИНАЦИОННОЙ СВЯЗИ.....	147

ВВЕДЕНИЕ

В основе применения физических методов исследований в химии лежит связь между характеристиками физических сигналов и химическим составом, молекулярным и электронным строением вещества.

Известно, что любое вещество состоит из определенных атомов, которые, в свою очередь, состоят из ядер и электронных оболочек. Энергии внутренних и валентных подуровней атома достаточно сильно различаются. Общая энергия молекул состоит из поступательной, вращательной и колебательной энергий ядра и электронов. При изучении строения молекул или атомов используют различные методы их энергетического возбуждения. К основным методам относятся: рентгеновское, ультрафиолетовое, инфракрасное излучения, а также – энергия магнитного поля. Результат такого возбуждения экспериментально фиксируется в виде сигнала на регистрирующем приборе в виде полос либо линий в соответствующем спектре. Параметры этих полос являются физическими сигналами, несущими информацию о типе, строении и свойствах молекул или атомов. Название существующих физических методов исследований соответствует способу возбуждения электронов в веществе.

В настоящем пособии рассмотрены некоторые аспекты теории и применения **ИНФРАКРАСНОЙ (ИК)** спектроскопии в химии.