

„Zwiększenie liczby wysoko wykwalifikowanych absolwentów kierunków ścisłych Uniwersytetu Jagiellońskiego”

POKL.04.01.02-00-097/09-00

Zastosowanie spektroskopii w podczerwieni IR do określania struktury związków organicznych cz.2

Wykład dla III roku Chemii UJ

Dr Katarzyna Ostrowska

Projekt współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego



KAPITAŁ LUDZKI
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI
FUNDUSZ SPOŁECZNY





Kurs „Wprowadzenie do spektroskopii w podczerwieni”

<http://pegaz.uj.edu.pl>

„Spektroskopowe metody identyfikacji związków organicznych”

R. M. Silverstein; F. X. Webster; D. J. Kiemle

Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2007

„Określenie Struktury Związków Organicznych metodami spektroskopowymi.

Tablice i ćwiczenia „

Praca zbiorowa pod redakcją Mirosława Szafrana i Zofii Dega-Szafran

Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1988

„Introduction to Spectroscopy”

D. L. Pawia; G. M. Lampman; G. S. Kriz

Harcourt Inc. 2001

ISBN-0-03-031961-7

„Organic Structural Spectroscopy”

J. B. Lambert; H. F. Shurvell; D. A. Lightner; R. G. Cooks

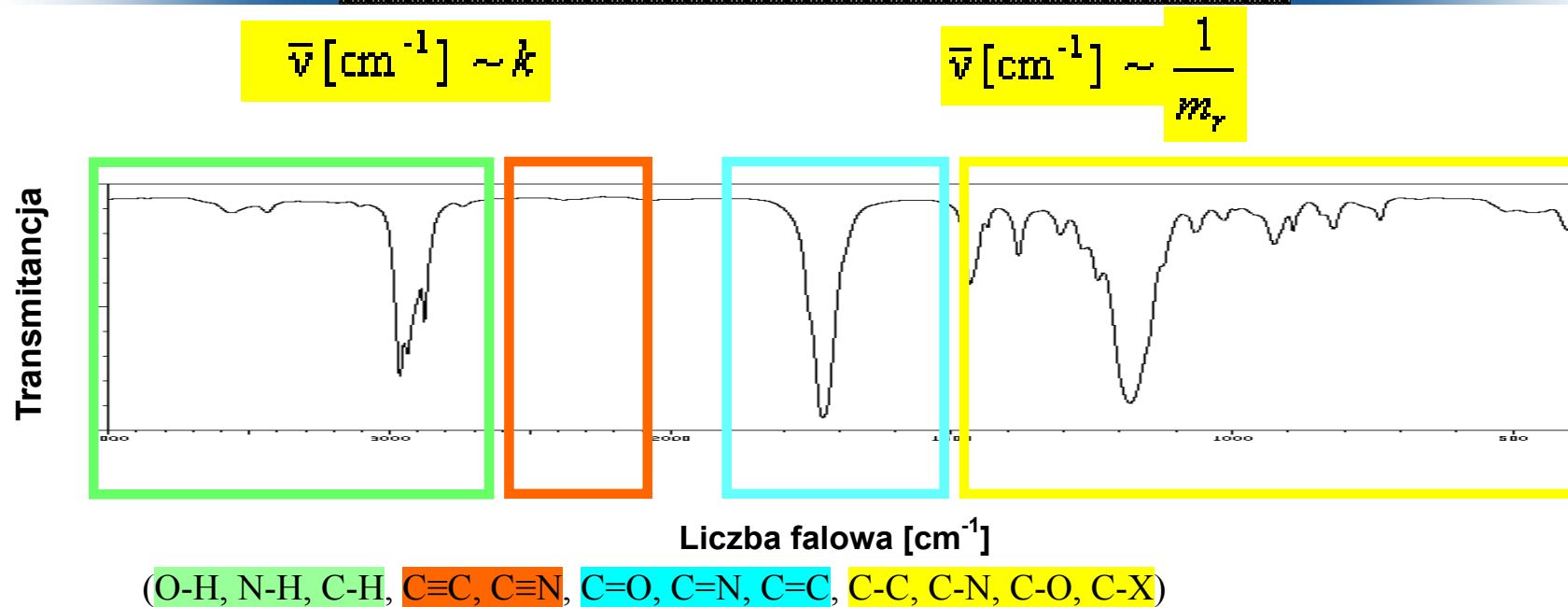
Prentice Hall, Inc. 1998

ISBN-0-13-258690-8

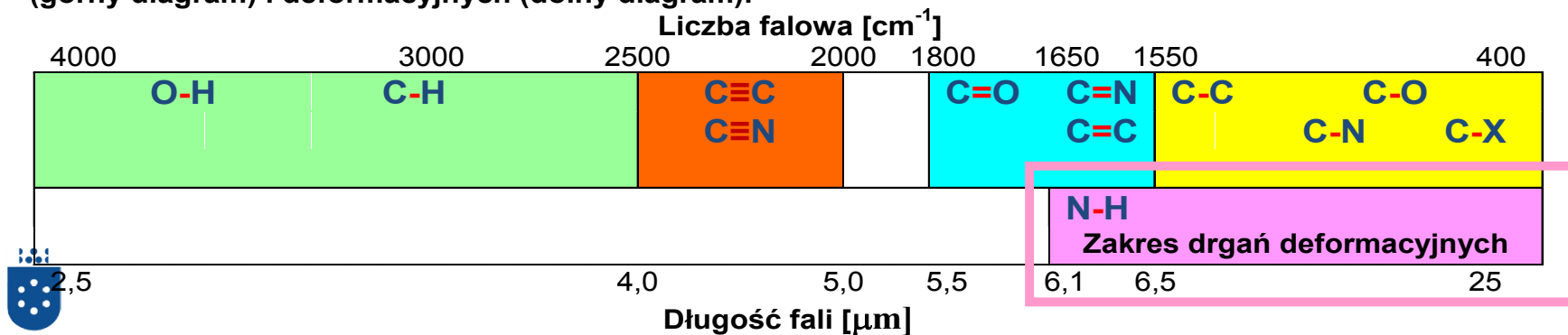
Korzystano z widm IR zamieszczonych w bazie Spectral Database for Organic Compounds,

SDBS, [National Institute of Advanced Industrial Science and Technology \(AIST\)](http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/), Japan.





Porównanie zakresów występowania pasm absorpcji pochodzących od drgań walencyjnych (górny diagram) i deformacyjnych (dolny diagram).





		Typ drgań	Liczba falowa[cm ⁻¹]	Intensywność
C—H	Alkany		3000 - 2850	s
	-CH ₃	deformacyjne	1450 i 1375	m
	-CH ₂ -	deformacyjne	1365	m
	Alkeny		3100 - 3000	m
		oop	1000 - 650	s
	Zw Aromatyczne		3150 -3050	s
		oop	900 - 600	s
	Alkiny		3300	s
	Aldehydy		2900 - 2800	w
			2800 -2700	w
C—C	Alkany		nie podlegają interpretacji	
C=C	Alkeny		1680 - 1600	m - w
	Zw. Aromatyczne		1600 i 1475	m - w
C≡C	Alkiny		2250 - 2100	m - w





		Liczba falowa[cm ⁻¹]	Intensywność
C=O	Aldehydy	1740 -1720	s
	Ketony	1725 -1705	s
	Kwasy karboksylowe	1725 -1700	s
	Estry	1750 - 1730	s
	Amidy	1680 - 1630	s
	Bezwodniki	1810 i 1760	s
	Chlorki kwasowe	1800	s
C—O	Alkohole, Estry, Etery, Kwasy, Bezwodniki	1300 -1000	s
O—H	Alkohole, Fenole		
	wolne	3650 - 3600	m
	Związane wiązaniem wodorowym	3400 -3200	m
	Kwasy	3400 -3 200	m

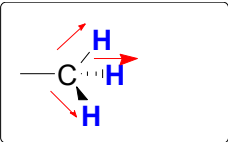
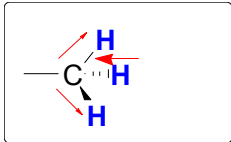
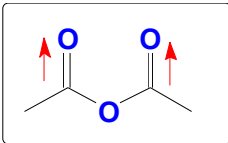
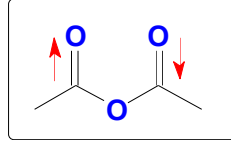
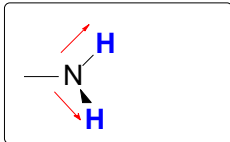
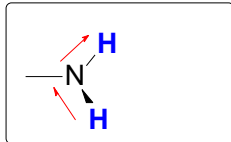
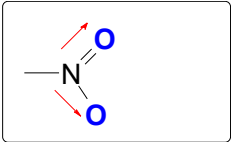
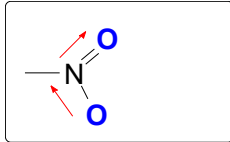




		Typ drgań	Liczba falowa[cm ⁻¹]	Intensywność
N—H	Aminy 1° i 2° Amidy 1° i 2°		3500 - 3100	m
			3500 - 3100	
		deformacyjne	1640 0 1550	m - s
C—N	Aminy		1350 -1000	m - s
C=N	Iminy, Oksymy		1690 -1640	w - s
C≡N	Nitryle		2260 - 2240	m
Y=C=X	Kumuleny		2270 -1940	m - s
N=O	Zw. Nitrowe		1550 i 1350	s
S—H	Merkaptany		2550	w
S=O	Sulfotlenki Sulfony, sulfonamidy		1050	
			1375 - 1300 i	s
			1350 - 1140	s
C—X	Fluorki		1400 - 1000	s
	Chlorki		785 - 549	s
	Bromki. Jodki		< 667	s



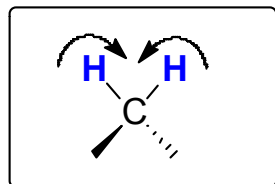


	drganie walencyjne symetryczne	drganie walencyjne asymetryczne
Grupa metylowa —CH ₃	 2872 cm ⁻¹	 2962 cm ⁻¹
Bezwodnik	 1760 cm ⁻¹	 1800 cm ⁻¹
Grupa aminowa —NH ₂	 3300 cm ⁻¹	 3400 cm ⁻¹
Grupa nitrowa —NO ₂	 1350 cm ⁻¹	 1550 cm ⁻¹



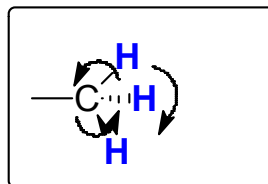


Grupa metylenowa

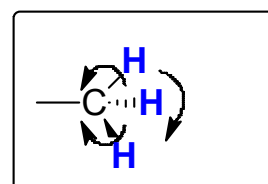


drganie deformacyjne
nożycowe
 1465 cm^{-1}

Grupa metylowa



drganie deformacyjne
asymetryczne
 1450 cm^{-1}

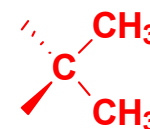


drganie deformacyjne
symetryczne
 1375 cm^{-1}

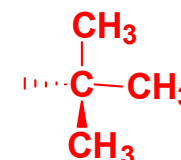
często pasma nakładają się

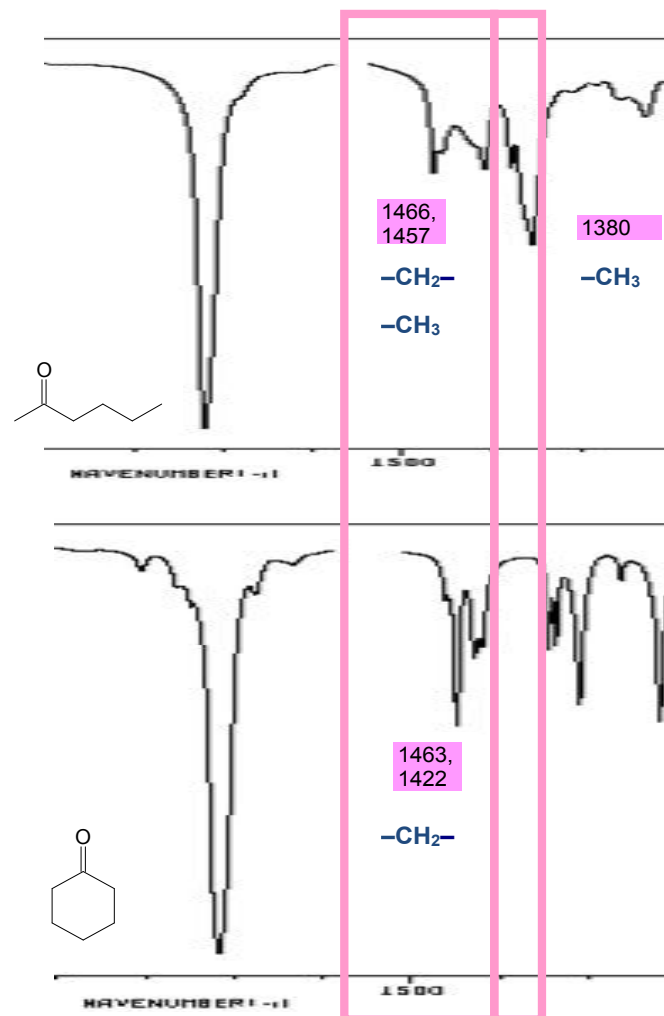
zawsze obecne dla grupy —CH_3

1380 cm^{-1} 1370 cm^{-1}



1390 cm^{-1} 1370 cm^{-1}





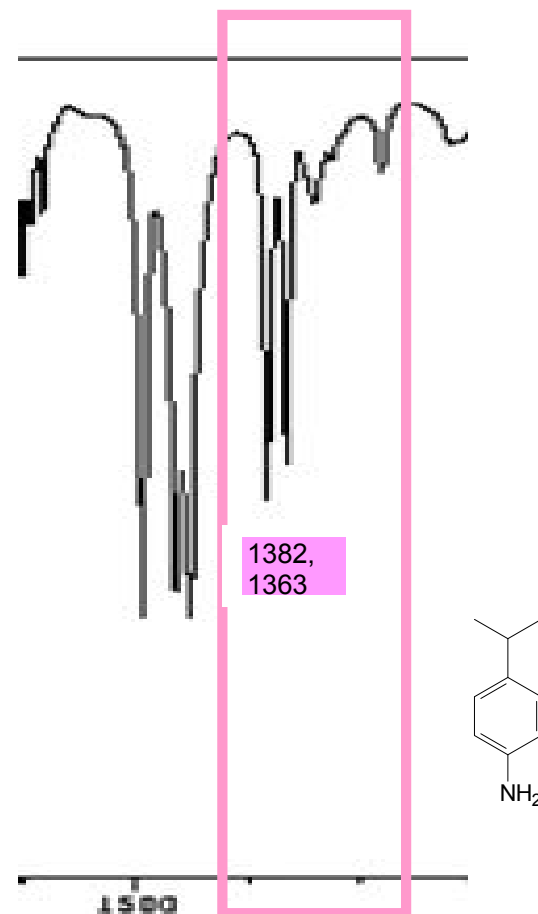
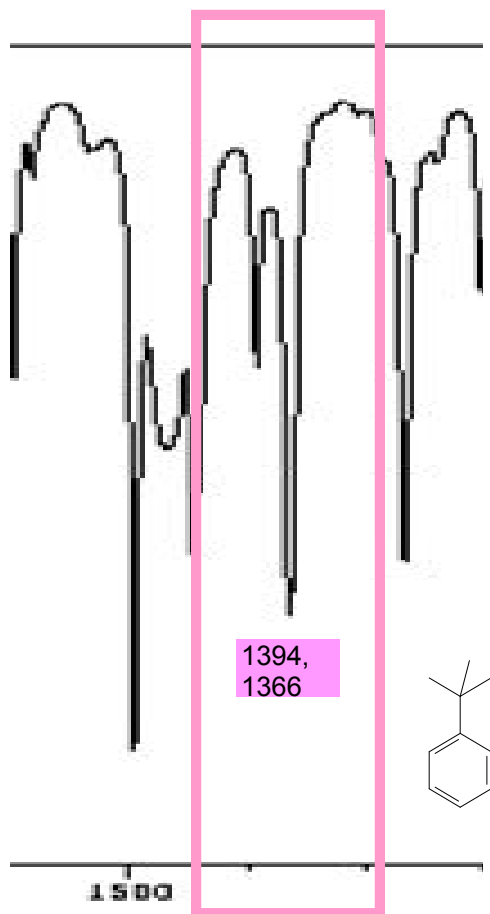


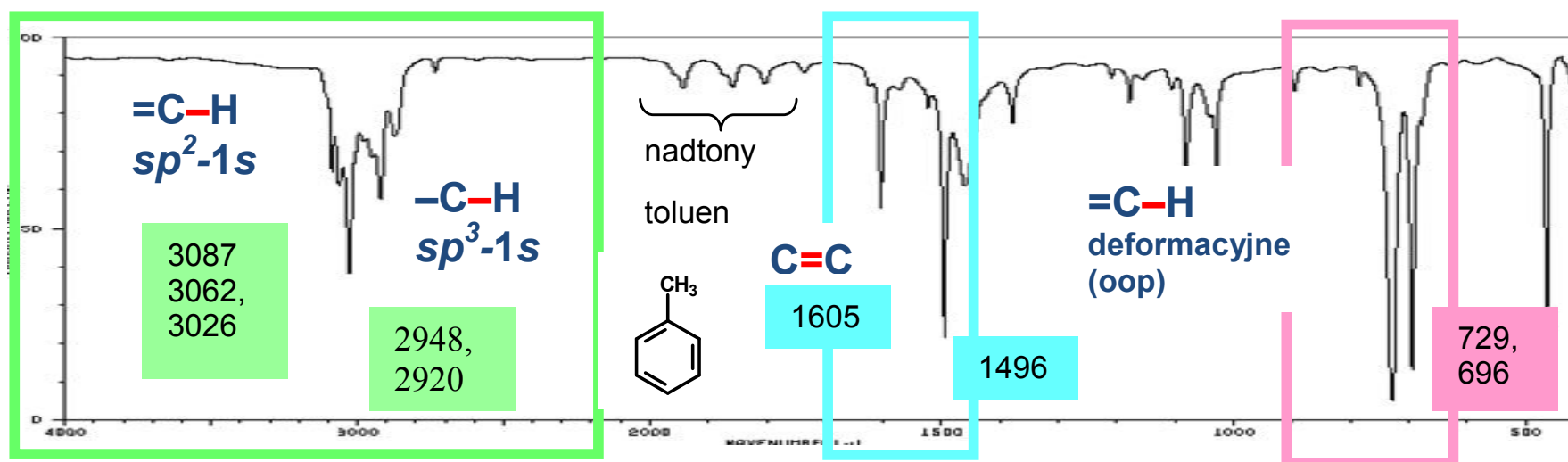
Częstości drgań deformacyjnych symetrycznych grupy CH₃

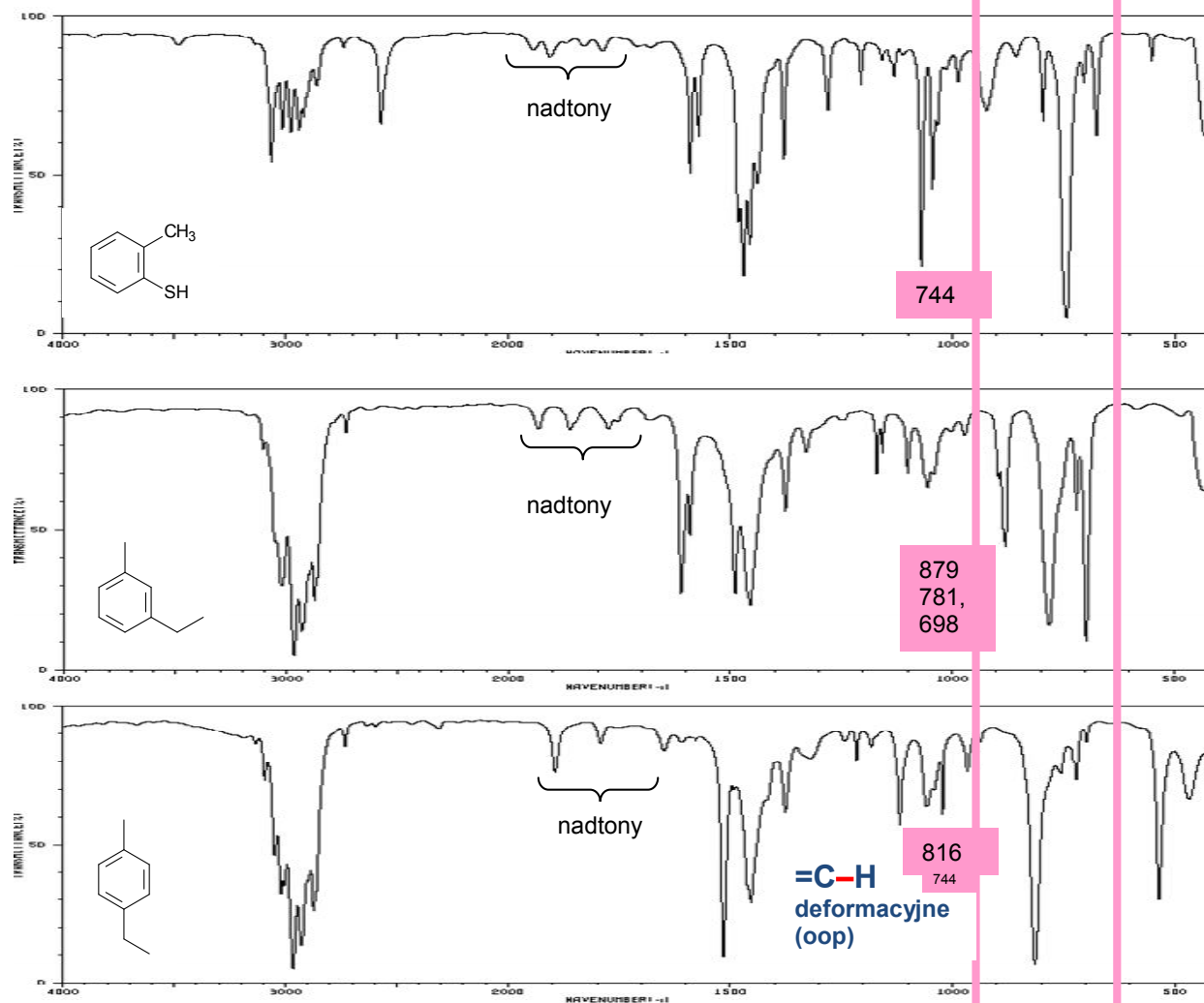
		Zakres cm ⁻¹
Estry, etery	O-CH ₃	1460 -1430
Aminy, amidy	N-CH ₃	1440 -1410
Węglowodory	C-CH ₃	1380 - 1360
Sulfotlenki, tioetery	S-CH ₃	1330 -1290
Fosfiny	P-CH ₃	1310 -1280
Silany	Si-CH ₃	1280 -1250
Związki rtęci	Hg-CH ₃	1210-1190

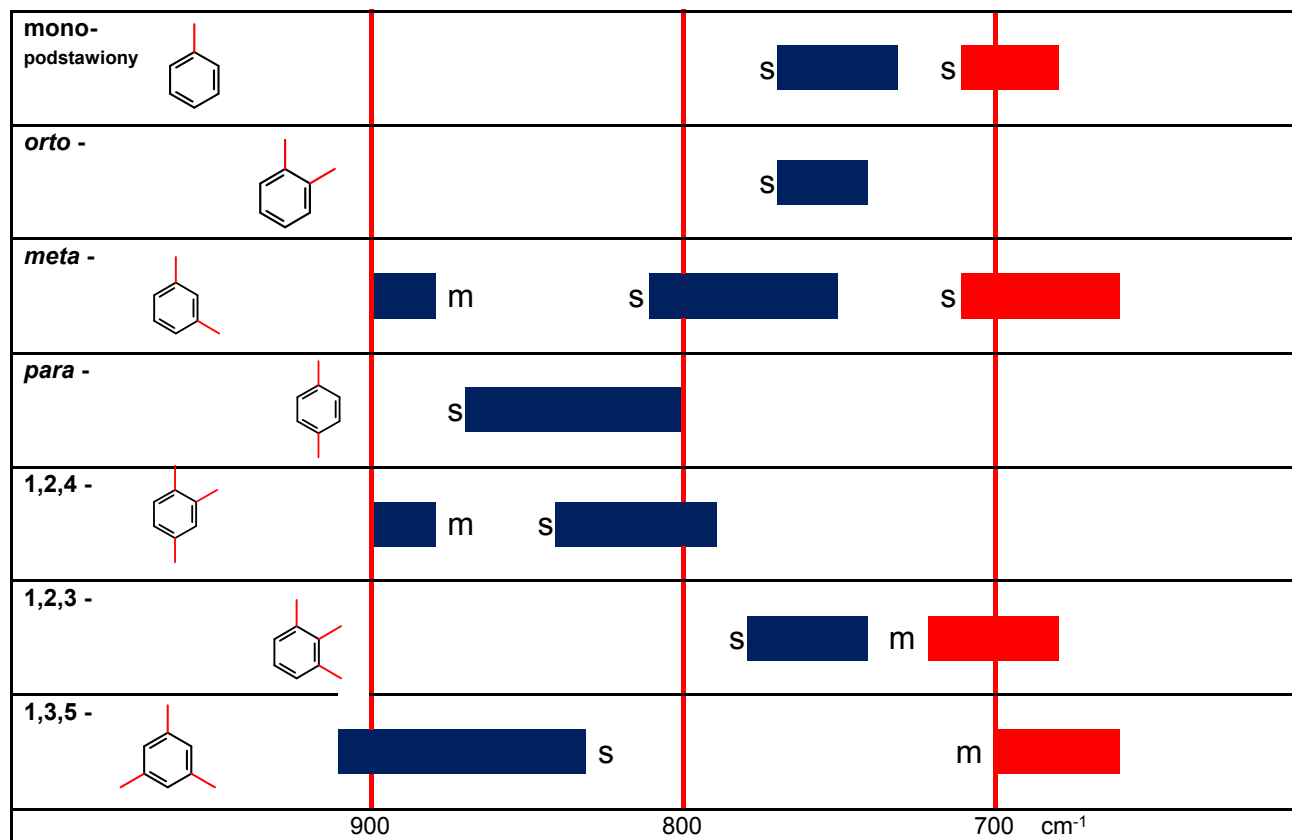
Organic Structural Spectroscopy”
J. B. Lambert; H. F. Shurvell; D. A. Lightner; R. G. Cooks
Prentice Hall, Inc. 1998
ISBN-0-13-258690-8











Zakres drgań deformacyjnych **C=C** i **C-H** (out of plane) podstawionych pochodnych benzenu.



‘ Introduction to Spectroscopy’,

D. L. Pawia, G. M. Lampman, G. S. Kriz, ISBN: 0-03-031961-7