

Л. А. КАЗИЦЫНА
Н. Б. КУПЛЕТСКАЯ

Применение УФ-, ИК- и ЯМР- спектроскопии в органической химии

Допущено Министерством высшего
и среднего специального образования
СССР в качестве учебного пособия
для студентов химических специаль-
ностей университетов



ИЗДАТЕЛЬСТВО «ВЫСШАЯ ШКОЛА»
МОСКВА — 1971

Магнит вызывает расщепление энергетических уровней магнитных ядер, т. е. создает необходимые условия для поглощения радиочастотного излучения. Радиочастотный генератор возбуждает магнитное поле, перпендикулярное к постоянному полю. При определенном соотношении этих полей наступает резонансное поглощение энергии, которое регистрируется радиочастотным детектором. Условия резонанса можно достичь либо изменением напряженности постоянного магнитного поля, либо изменением частоты генератора. Чаще используется второй принцип.

В настоящее время наиболее широко применяются спектрометры протонного магнитного резонанса с частотой 60 и 100 *Мгц* (в последние годы стали изготавливаться приборы с частотой 220 *Мгц*).

При получении спектров ядерного магнитного резонанса решающее значение имеет однородность и стабильность магнитного поля. Для этой цели применяются специальные стабилизаторы магнитного потока. Дополнительное улучшение однородности магнитного поля достигается вращением ампулы с образцом.

Измерение ПМР спектров органических соединений проводится для растворов достаточно высокой концентрации (5—20%). В качестве растворителей могут быть использованы соединения, не имеющие собственных сигналов в исследуемой области и не взаимодействующие с растворенным веществом. Такими растворителями могут быть четыреххлористый углерод и сероуглерод. Но не все соединения достаточно хорошо в них растворимы. Поэтому используются и другие растворители, не содержащие протонов или имеющие лишь один сигнал в спектре ПМР (D_2O , $CDCl_3$, бензол, циклогексан, хлороформ, диметилсульфоксид, диоксан и др.).

Поскольку химические сдвиги измеряются по отношению к эталону, то одновременно со спектром вещества должен быть получен и сигнал эталона. Эталонное вещество может быть добавлено непосредственно к исследуемому соединению (внутренний эталон) либо помещено в отдельную ампулу (внешний эталон). Вещества, используемые в качестве внутреннего эталона, не должны взаимодействовать с образцом.

Раствор исследуемого соединения помещают в цилиндрическую стеклянную ампулу с внешним диаметром 5 *мм*, внутренним 3 *мм* и длиной 15 *см*. Объем исследуемого раствора около 0,3 *мл*.

Спектр протонного магнитного резонанса записывают на бланках, ось абсцисс которых градуируется в единицах напряженности магнитного поля или единицах частоты. На спектре ПМР должны быть указаны направление изменения поля или частоты, шкала химических сдвигов и рабочая частота прибора. Также полезно указать растворитель и концентрацию раствора.

ЗАДАЧИ

В этом разделе приводятся упражнения и задачи по применению ИК-, УФ- и ПМР-спектроскопии для определения структуры органических соединений.

Наиболее полную информацию о функциональных группах, содержащихся в соединении, можно получить из инфракрасных спектров.

Стрессение углеводородного скелета определяется по данным ПМР-спектров.

Общий характер сопряжения в молекуле устанавливается по электронным спектрам.

Таким образом, по данным ИК-, УФ- и ПМР-спектров и брутто-формуле во многих случаях удастся определить структуру органического соединения.

При работе с инфракрасными спектрами и спектрами протонного магнитного резонанса используются таблицы характеристических частот и химических сдвигов. Для приобретения навыков в работе с таблицами в настоящем разделе особо выделены задачи по инфракрасной спектроскопии и спектроскопии протонного магнитного резонанса. В них предлагается провести как простое сопоставление спектров со строением органического соединения, так и определение структурных элементов молекулы по приведенному ИК- или ПМР-спектру.

По инфракрасным спектрам приводятся два типа корреляционных таблиц. В таблице первого типа в основу положены частоты поглощения и отвечающие им групповые колебания. Таблицы второго типа составлены по функциональным группам, в них приводятся все частоты, характерные для данной группы.

При решении задач по ИК-спектроскопии нельзя ограничиваться нахождением только одной полосы поглощения, а следует пользоваться совокупностью всех полос, характеризующих данный структурный элемент. Так, например, если обнаружено поглощение валентных колебаний $C-H$ выше 3000 $см^{-1}$, то молекула может содержать ароматическое кольцо, двойную связь или циклопропановое кольцо. Выбор может быть сделан по другим полосам: принадлежность к ароматическому ряду подтверждается полосами поглощения при 1600, 1500, 1450 $см^{-1}$ и интенсивному поглощению в области 900—700 $см^{-1}$, непредельные соединения можно определить по полосам в области 1680—1640 $см^{-1}$ (за исключением симметричных *транс*-соединений) и специфическому поглощению ниже 1000 $см^{-1}$.

Нужно помнить, что при помощи инфракрасных спектров можно определить только структурные элементы и не следует добиваться полной расшифровки структуры молекулы.

В ответах подробно разобраны решения нескольких задач, для остальных дается структурная формула соединения и приводятся только те частоты, отнесение которых не вызывает сомнения. Для понимания возможностей метода ИК-спектроскопии полезно сравнить структурную формулу соединения с приведенным ИК-спектром и оценить ограничения метода.

Химические сдвиги протонов представлены в нескольких таблицах. В них приводятся химические сдвиги протонов метильной, метиленовой и метиновой групп, непредельных и ароматических соединений и некоторых других типов протонов. Если таблицы не содержат необходимых данных для замещенных метана, можно применить константы экранирования Шулеры, приведенные в специальной таблице.

При решении задач по ПМР-спектрам первого порядка следует руководствоваться следующими положениями.

1. Обычно число сигналов в спектре соответствует числу групп неэквивалентных протонов в соединении. Однако иногда может быть совпадение сигналов. Так, например, метилацетилен $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CH}$ дает только один сигнал в спектре ПМР.

2. Положение сигналов (химический сдвиг) определяется группами, экранирующими протон.

3. Мультиплетность сигналов дает возможность установить число протонов соседних групп.

4. Соотношение интегральных интенсивностей сигналов пропорционально числу протонов.

При решении задач по ПМР-спектрам полезно проводить сопоставление данных протонного резонанса с инфракрасными спектрами.

В сборнике имеется некоторое количество задач по использованию электронных спектров поглощения. Они составлены с таким расчетом, чтобы была ясна область применения УФ-спектроскопии: в задачах предлагается сделать выбор между возможными структурами, имеющими сопряженные и изолированные хромофорные группы, объяснить изменения в спектрах, происходящие под влиянием растворителей. В сборник включен также ряд задач по совместному использованию УФ- и ИК-спектроскопии или ИК- и ПМР-спектроскопии.

В завершающей части этого раздела помещены задачи по совокупному применению трех спектральных методов — УФ-, ИК- и ПМР-спектроскопии, в которых предлагается на основании этих спектров определить структуру соединений. Ответы на эти задачи даны в очень краткой форме с указанием лишь основных характеристик приведенных спектров.

Если строение исследуемого вещества может быть определено при помощи одного или двух методов, то данные остальных следует

использовать для подтверждения предложенной структуры. При решении задач спектры могут рассматриваться в любом порядке, но рекомендуется начинать рассмотрение с ИК-спектра.

Спектры для задач были взяты из справочников, список которых приведен в конце книги, или из оригинальной литературы.

* * *

1. Один из изомерных нафтолов имеет спектр, приведенный на рис. II.1, а. На рис. II.1, б и в даны спектры α - и β -нафтолов. Определите, какому из изомеров идентично соединение а.

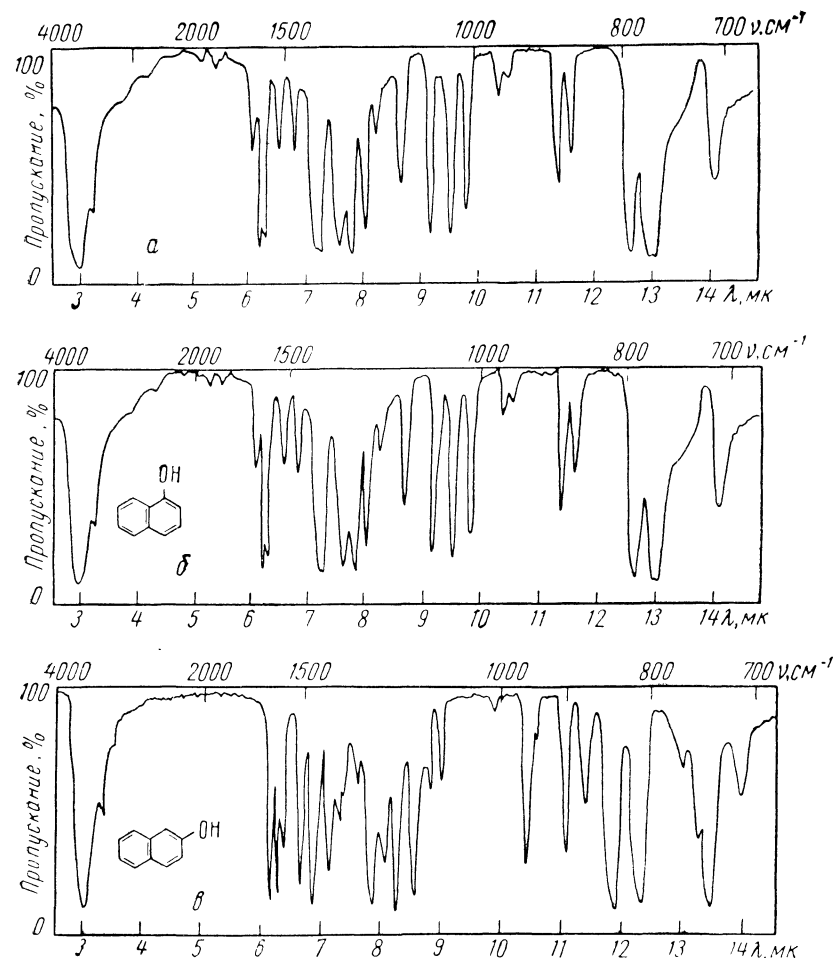


Рис. II.1

2. Из смеси галогенированных углеводородов выделено вещество, имеющее спектр, приведенный на рис. II.2, а. Определите, что это за вещество, если известно, что в смеси имеются соединения, спектры которых приведены на рис. II.2, б, в, г.

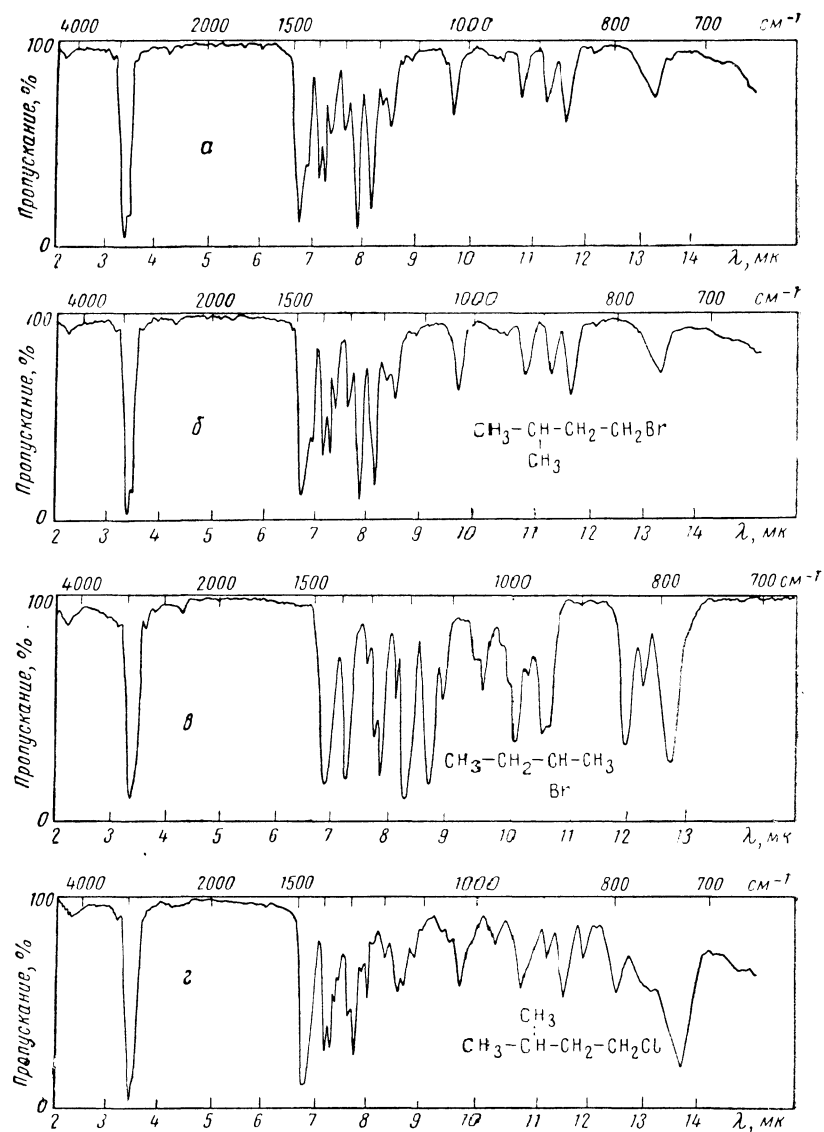


Рис. II.2

3. Полученный в результате реакции нитрофенол имеет спектр, приведенный на рис. II.3, а. На основании известных спектров о-, м-, и п-нитрофенолов и 2,4-динитрофенола (рис. II.3, б, в, г, д, соответственно) определите, какое соединение получено.

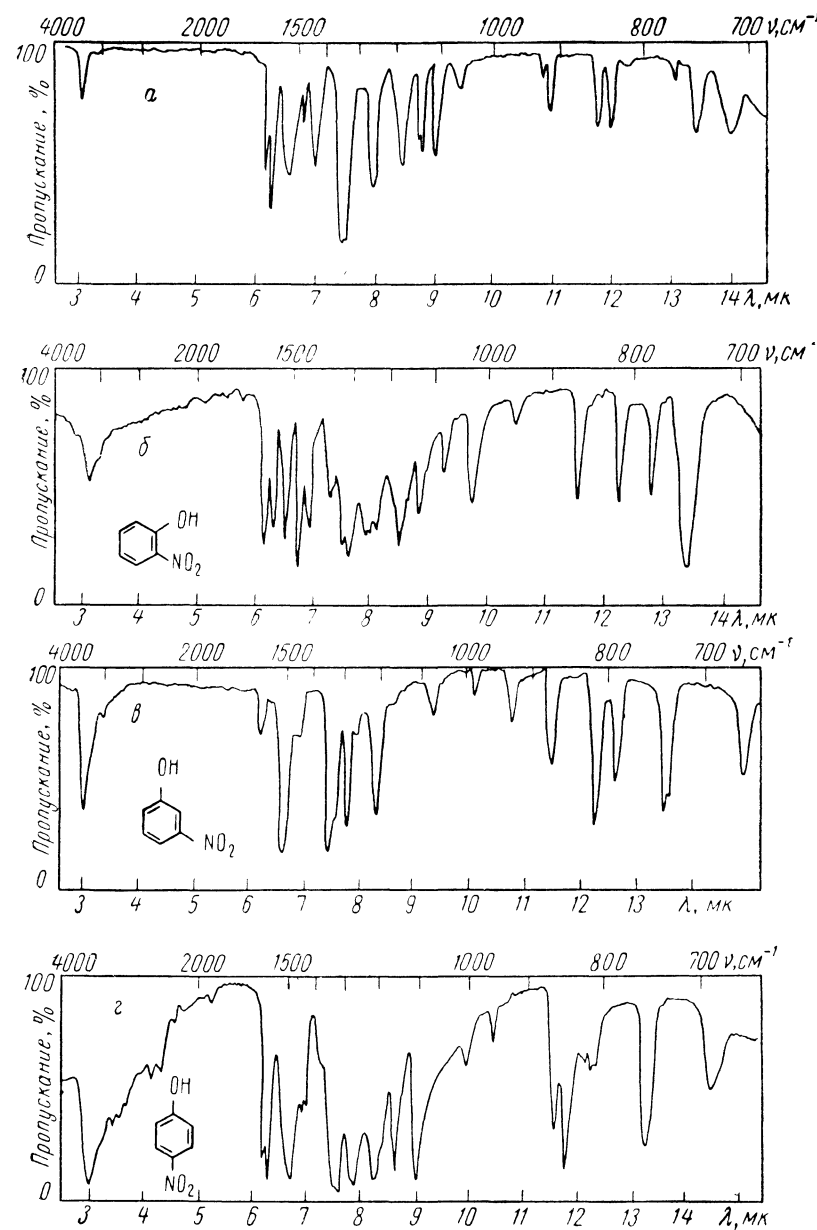


Рис. II.3

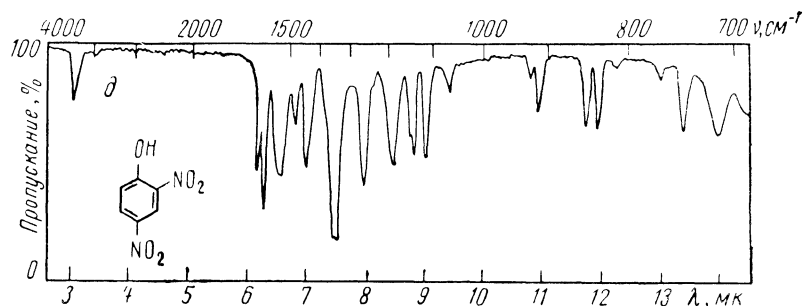


Рис. II.3 (продолжение)

4. Определите по ИК-спектру, приведенному на рис. II.4 (жидкая пленка)¹, в какие функциональные группы входят кислород и сера в соединении с брутто-формулой $C_6H_{14}O_2S$, (рис. II.4).

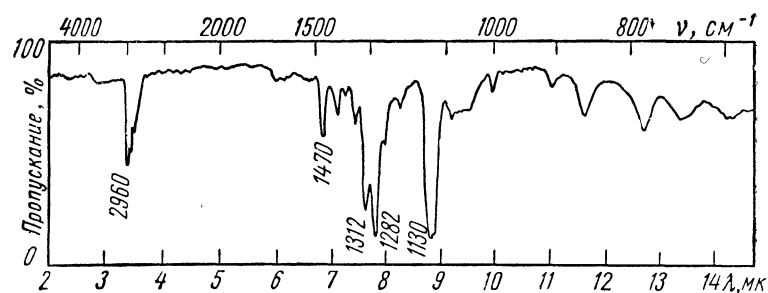


Рис. II.4

5. Соединение с брутто-формулой $C_6H_4Cl_2N_2O_2$ имеет спектр, приведенный на рис. II.5 (в пластинке KBr). Определите, в какую функциональную группу входят атомы кислорода и азота.

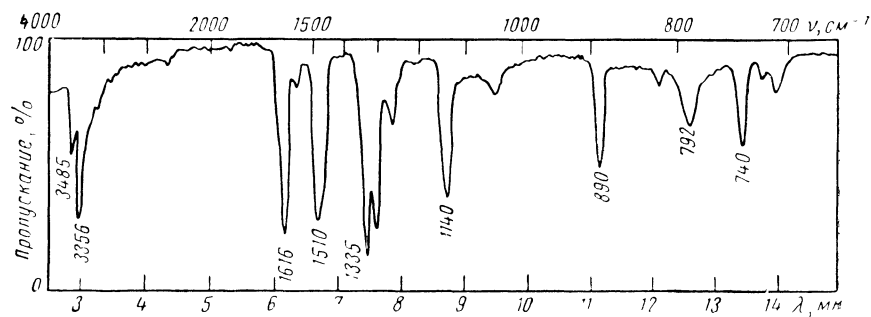


Рис. II.5

6. Какие кислород- и азотсодержащие группы входят в соединение $C_3H_7O_2N$ (рис. II.6, жидкая пленка)?

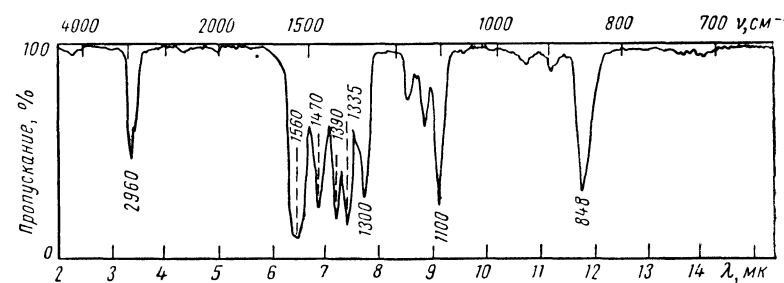


Рис. II.6

7. Спектр соединения $C_7H_{13}ON$ представлен на рис. II.7 (в пластинке KBr). Какие структурные элементы можно определить по спектру?

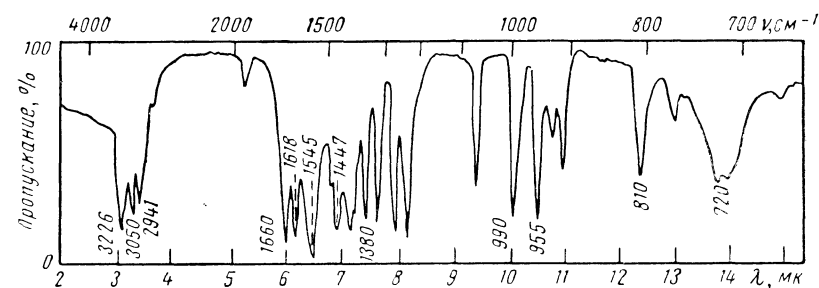


Рис. II.7

8. В какие функциональные группы входят атомы кислорода в соединении с брутто-формулой $C_8H_{16}O_2$ (рис. II.8, жидкая пленка)?

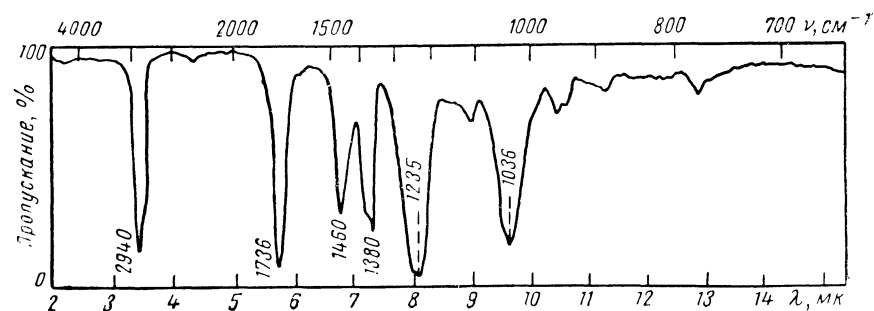


Рис. II.8

¹ Здесь и далее в скобках указаны условия получения спектров.

9. В какие функциональные группы входят атомы азота в соединении $C_6H_9N_3$, спектр которого приведен на рис. II.9 (жидкая пленка)?

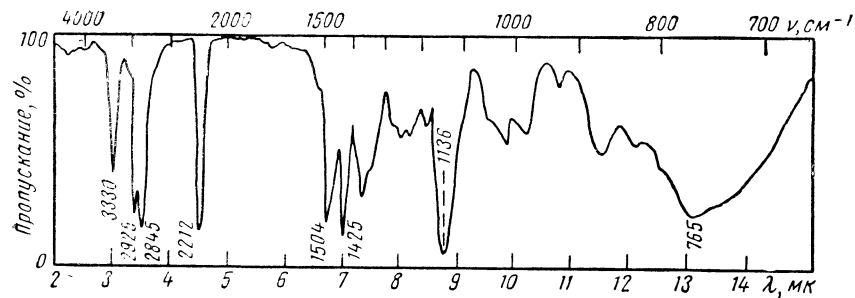


Рис. II.9

10. Какие структурные элементы можно определить в соединении C_8H_9ON , спектр которого приведен на рис. II.10 (в пластинке KBr)?

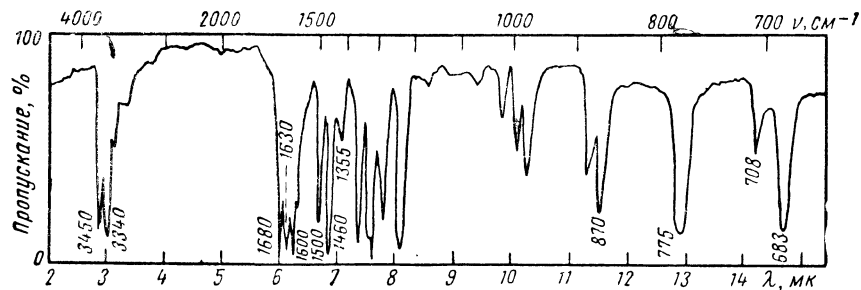


Рис. II.10

11. Проведите сопоставление полос поглощения в ИК-спектре, приведенном на рис. II.11 (в пластинке KBr), со структурой соединения $(C_6H_5CH_2)_2SO$.

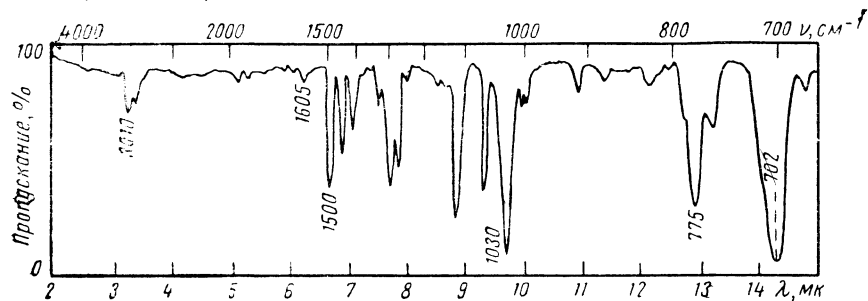


Рис. II.11

12. По ИК-спектру (рис. II.12, жидкая пленка) и брутто-формуле $C_9H_{13}O_2N$ определите структурные элементы соединения.

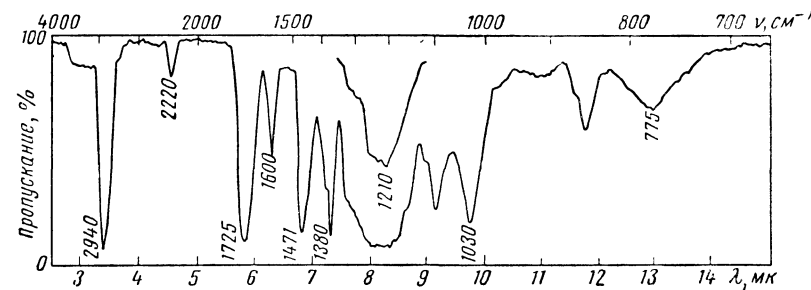


Рис. II.12

13. В какие функциональные группы входят атомы серы в соединении $C_2H_6S_2$ (рис. II.13, жидкая пленка).

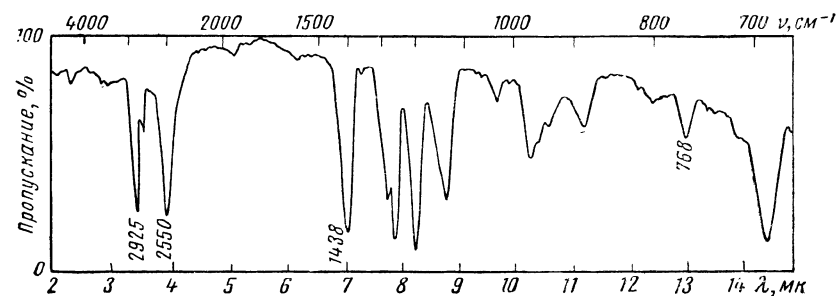


Рис. II.13

14. Сопоставьте основные полосы поглощения в ИК-спектре, приведенном на рис. II.14, с соответствующими колебаниями групп соединения

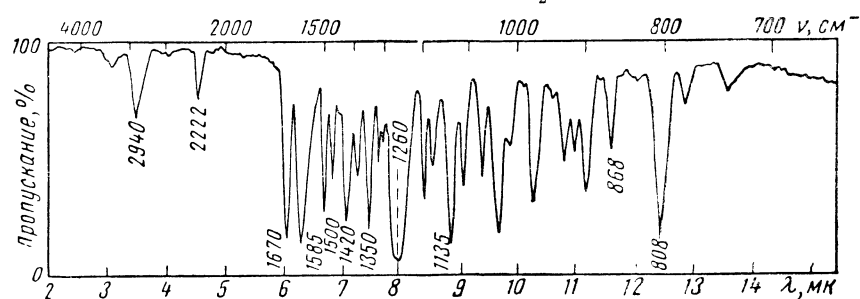
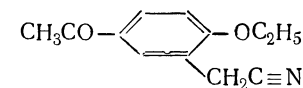


Рис. II.14

15. Какие структурные элементы соединения можно определить по спектру (рис. II.15, в пластинке KBr) и брутто-формуле C_7H_7ClO ?

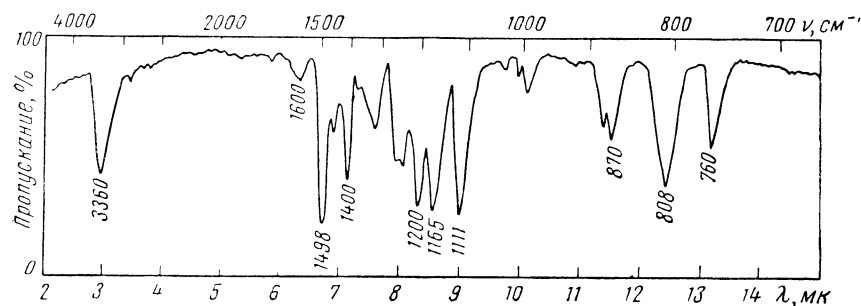


Рис. II.15

16. По ИК-спектру (рис. II.16, жидкая пленка) и брутто-формуле $C_4H_{10}O$ выскажите предположение о структуре соединения.

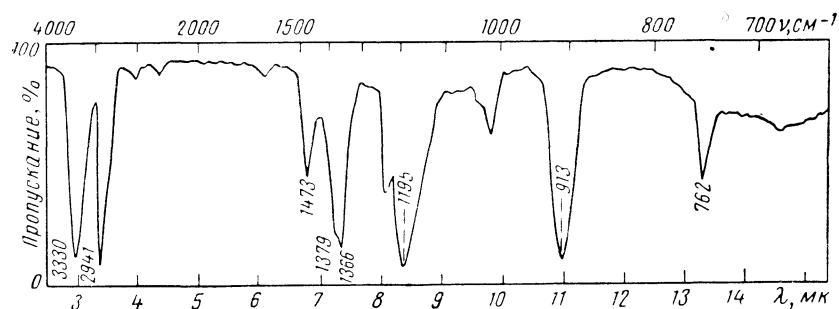


Рис. II.16

17. Какие кислород-, азот- и серосодержащие группы имеются в соединении $C_{12}H_{10}ClO_2NS$ (рис. II.17, жидкая пленка)?

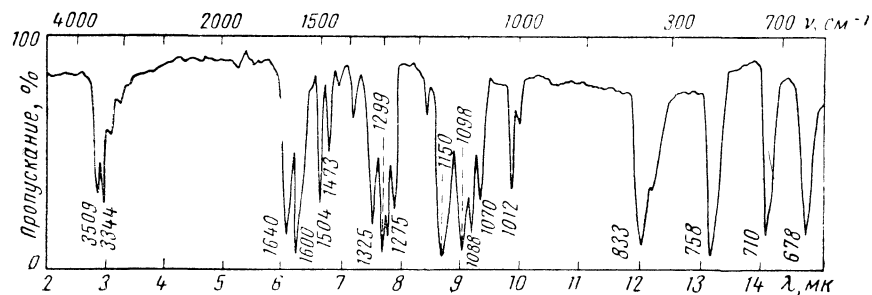


Рис. II.17

18. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_8H_8O_2$ (рис. II.18)?

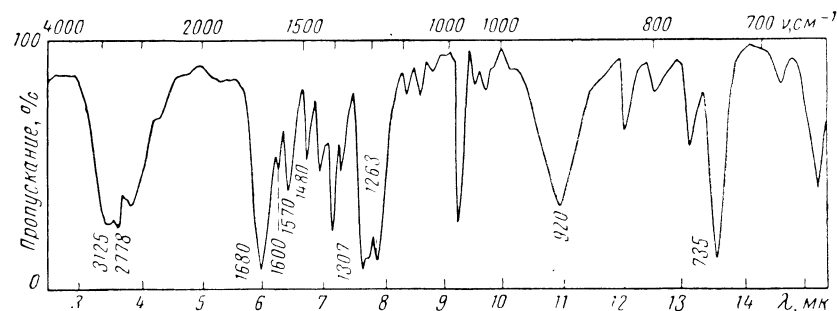


Рис. II.18

19. Сопоставьте полосы поглощения ИК-спектра (рис. II.19) со структурой соединения $ClCH_2CH_2CN$.

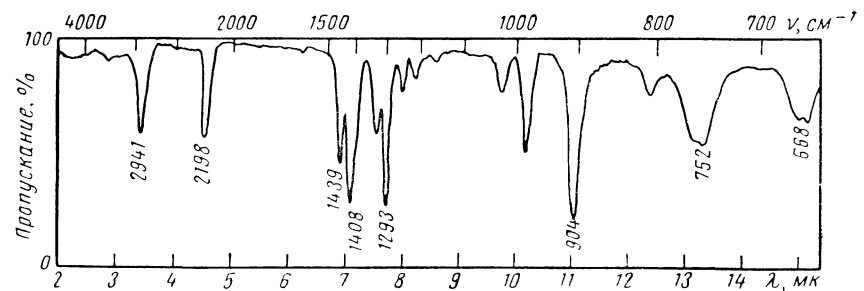


Рис. II.19

20. Сопоставьте полосы поглощения (рис. II.20, в пластинке KBr) со структурой соединения

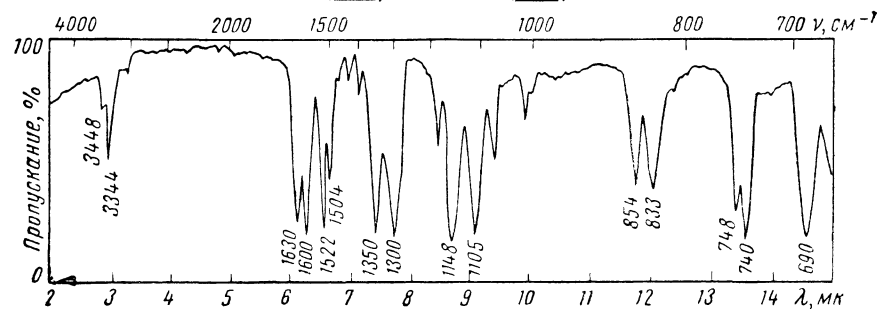
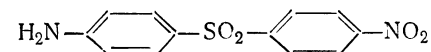


Рис. II.20

21. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_8H_6O_2N_2$ (рис. II.21, в пластинке KBr)?

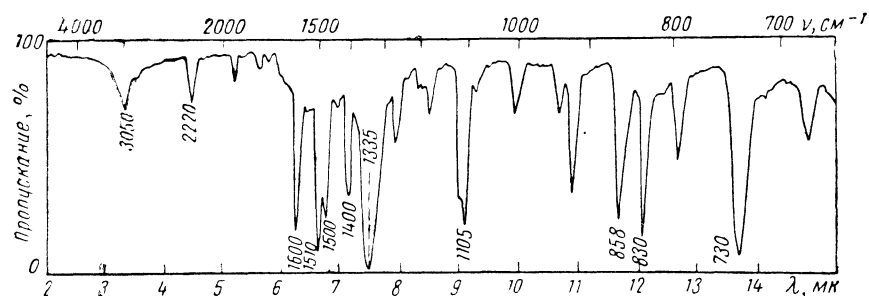


Рис. II.21

22. Выскажите предположение о структуре соединения по приведенному ИК-спектру и брутто-формуле $C_5H_8O_2$ (рис. II.22, жидкая пленка).

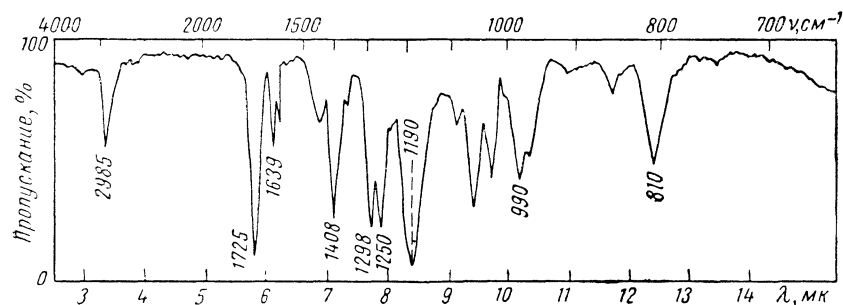


Рис. II.22

23. Объясните спектр стеариновой кислоты $CH_3(CH_2)_{14}COOH$, (рис. II.23), снятый для твердого соединения. Какие изменения будут наблюдаться в спектре жидкой кислоты или ее раствора в CCl_4 ?

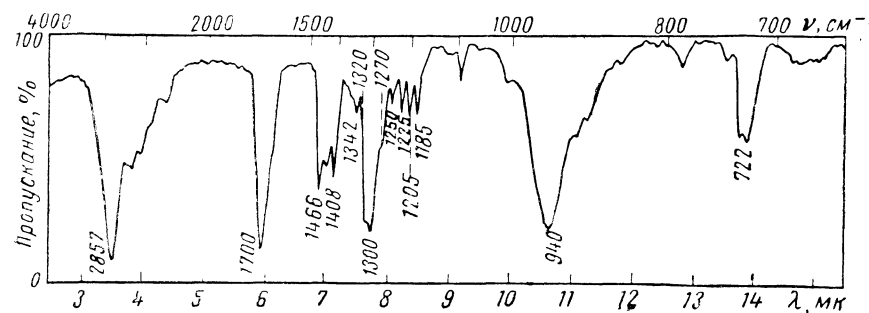


Рис. II.23

24. К какому типу соединений относится вещество C_7H_5OSi , спектр которого показан на рис. II.24 (жидкая пленка)?

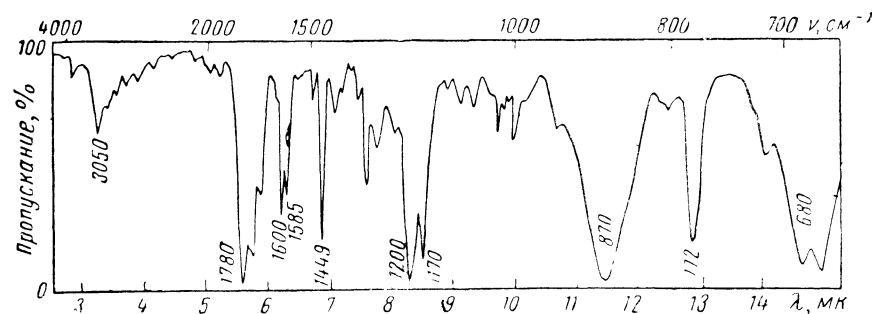


Рис. II.24

25. Какие структурные элементы можно определить по ИК-спектру соединения $C_9H_{11}O_2N$ (рис. II.25, жидкая пленка)?

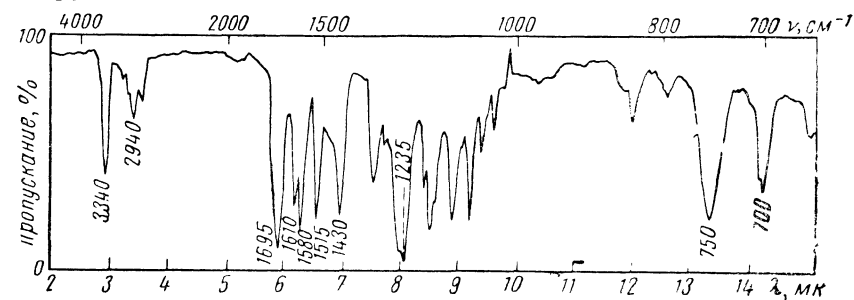


Рис. II.25

26. Сопоставьте основные полосы поглощения ИК-спектра (рис. II.26, в пластинке KBr) со структурой соединения $(C_6H_5CH_2)_2SO_2$.

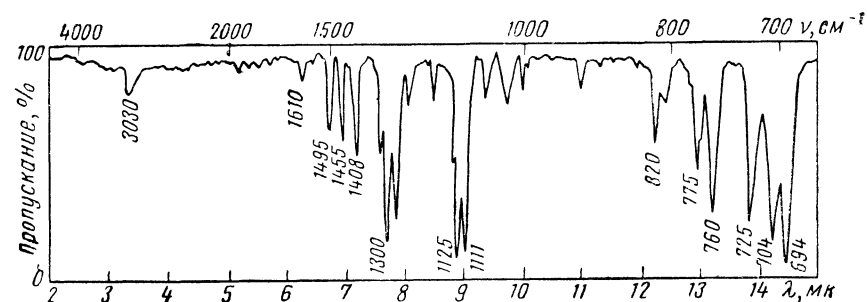


Рис. II.26

27. Определите структурные элементы соединения $C_9H_8O_2$ (рис. II.27, в растворе $CHCl_3$ и CS_2).

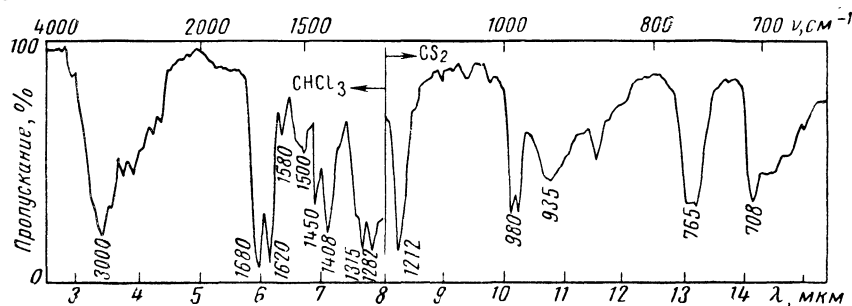
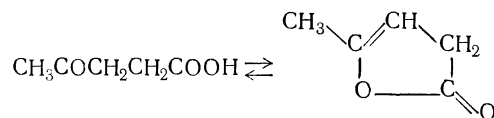


Рис. II.27

28. Какой формуле отвечает соединение, если в ИК-спектре найдена частота 1280 см^{-1} и отсутствует поглощение в области $600\text{—}800\text{ см}^{-1}$:



29. В какой форме — открытой или лактонной существует леволиновая кислота, если в ИК-спектре найдены полосы $3260, 2970, 2930, 2870, 2850, 1720, 1705, 900\text{ см}^{-1}$?



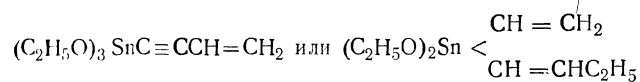
30. Какова формула вещества: $CH_3COOC_2H_5$ или C_2H_5COOH , если в ИК-спектре наряду с другими полосами имеется широкая полоса в области $3250\text{—}2600\text{ см}^{-1}$ и полосы при 1725 и 900 см^{-1} ?

31. Какую формулу имеет соединение: $(CH_3)_2CHCH_2CH_2NO_2$ или $(CH_3)_2CHCH_2CH_2O-N=O$, если в его спектре найдены частоты $2970, 2930, 2870, 2850, 1653, 1613\text{ см}^{-1}$ и дублет 1383 и 1370 см^{-1} ?

32. Какой продукт образовался при окислении диметилсульфида $(CH_3)_2S$: сульфоксид $(CH_3)_2SO$ или сульфон $(CH_3)_2SO_2$, если в ИК-спектре найдены полосы 1320 и 1150 см^{-1} и отсутствует поглощение в области $1070\text{—}1030\text{ см}^{-1}$?

33. Какую структуру имеет соединение: $CH_3CH(OH)NO_2$ или $CH_3CH_2ONO_2$, если в ИК-спектре найдены частоты $3600, 1550, 1370\text{ см}^{-1}$?

34. Какой формуле отвечает соединение:

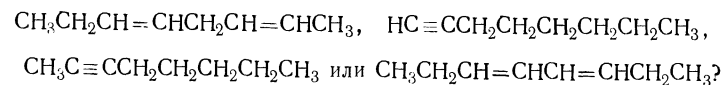


если в ИК-спектре обнаружены частоты 2136 и 1591 см^{-1} ?

35. В ИК-спектре раствора вещества найдены полосы $3450, 3370, 1630\text{ см}^{-1}$. Какому соединению соответствует спектр: $CH_3CON(CH_3)_2$, $CH_3CONHCH_3$ или CH_3CONH_2 ?

36. В ИК-спектре вещества найдены широкая полоса в области 3000 см^{-1} и полосы при $2970, 2930, 2895, 2870, 2850, 1705\text{ см}^{-1}$. Какому соединению отвечает спектр: $CH_3CH(OH)CH_2COCH_3$ или $CH_3CH_2CH_2COOCH_3$?

37. В ИК-спектре вещества наблюдаются полосы $3300, 2950, 2860, 2120, 1465, 1382\text{ см}^{-1}$. Какому соединению соответствует спектр:



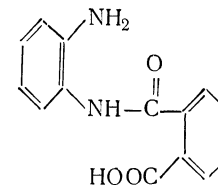
38. В ИК-спектре соединения наблюдаются полосы поглощения при $970, 1380, 1640, 2850, 2860, 3030$ и 3400 (широкая) см^{-1} . В растворе четыреххлористого углерода появляется узкая полоса при 3600 см^{-1} . Какому из веществ принадлежит спектр: $CH_3CH=CHCH_2OH$ или $CH_3COCH_2CH_3$?

39. Какое из двух веществ: $CH_3COCH_2CH_2CH=CH_2$ или $CH_3COCH=CHCH_2CH_3$ будет иметь в спектре полосы поглощения при $1715, 1640, 995$ и 915 см^{-1} ?

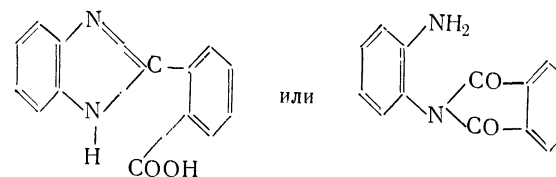
40. В спектре *o*-нитротолуола имеются полосы поглощения $2960, 2870, 1520, 1465, 1380, 1330, 850$ и 750 см^{-1} . После проведения реакции в спектре исчезают полосы $1520, 1330, 850, 750\text{ см}^{-1}$ и появляются новые полосы при $3420, 3340, 1644\text{ см}^{-1}$ и широкая полоса при 680 см^{-1} . Какая реакция проведена?

В результате другой реакции с *o*-нитротолуолом в спектре исчезают полосы поглощения при $2960, 2870, 1465, 1380\text{ см}^{-1}$ и появляется широкая полоса в области $2700\text{—}2600\text{ см}^{-1}$ и интенсивная полоса при 1680 см^{-1} . Какая реакция проведена на этот раз?

41. При циклизации амида



возможно образование двух продуктов реакции:



На рис. II.28 приведен спектр полученного вещества. Определите, какой из продуктов реакции образовался.

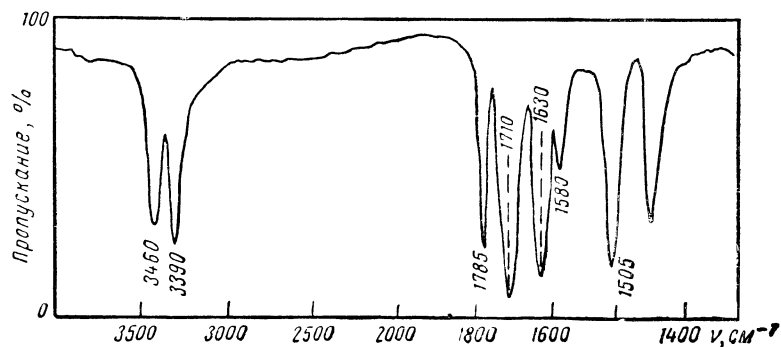
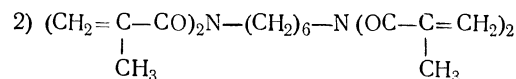
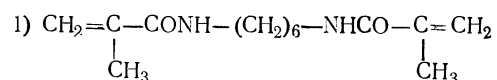


Рис. II.28

42. При реакции гексаметилендиамина с метакриловой кислотой выделены продукты:



Какому из этих продуктов соответствует приведенный на рис. II.29 ИК-спектр?

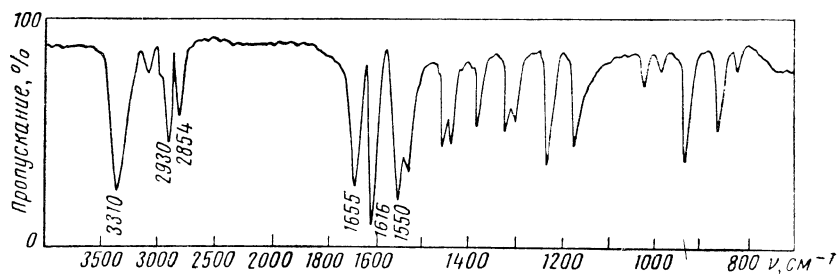


Рис. II.29

43. Какое строение имеет кремнийорганическое соединение:



Для него соответствует ИК-спектр, приведенный на рис. II.30?

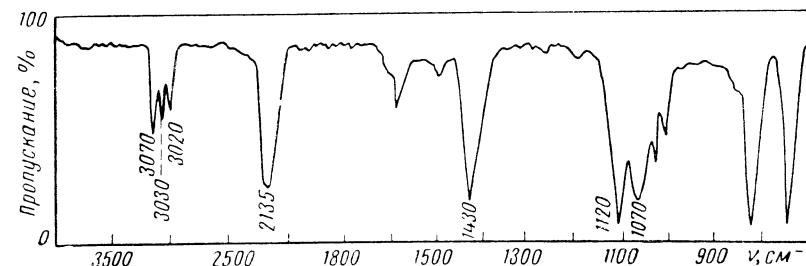


Рис. II.30

44. Какой из двух приведенных на рис. II.31 спектров принадлежит ди-*трет*-бутилферроцену с заместителями в разных кольцах?

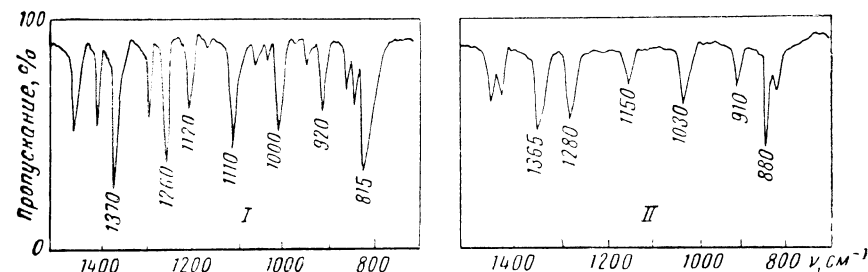
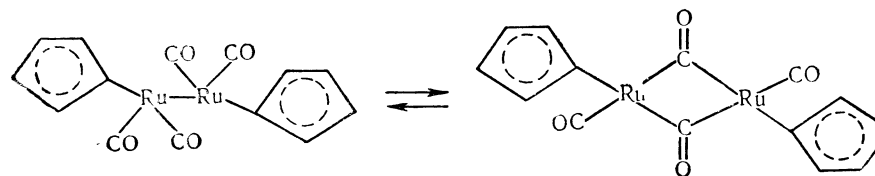


Рис. II.31

45. В растворе димер циклопентадиенилрутенийдикарбонила $[\text{Cp}_2\text{Ru}(\text{CO})_2]_2$ существует в виде равновесной смеси двух форм:



В твердом состоянии вещество содержит только одну из этих форм, спектр которой в области валентных колебаний CO дан на рис. II.32. Определите, какая это форма.

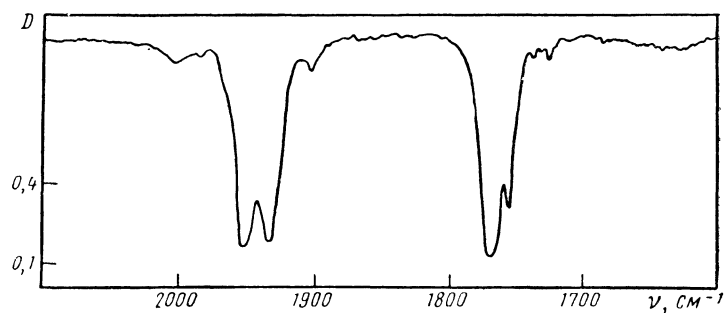


Рис. II.32

46. Сопоставьте спектр ПМР (рис. II.33) со структурой соединения $(C_6H_5)_2CHCOCH_3$.

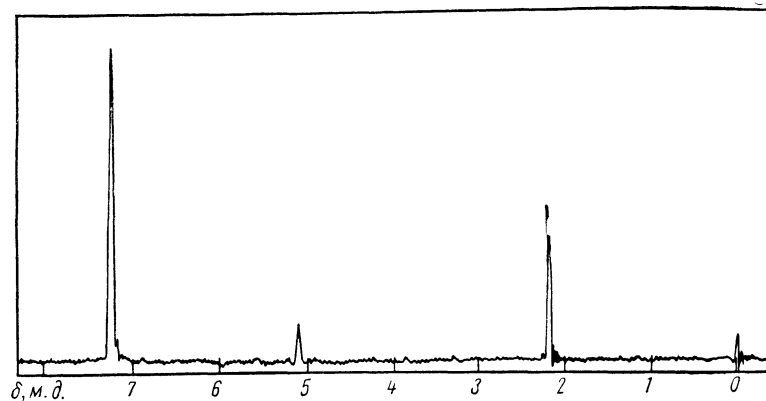


Рис. II.33

47. Сопоставьте спектр ПМР (рис. II.34) со структурой соединения

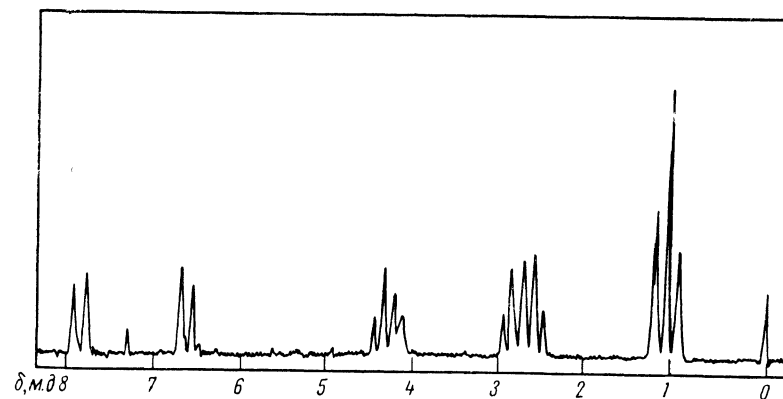
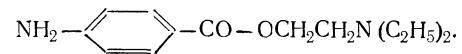


Рис. II.34

48. Объясните спектр ПМР диэтилового эфира янтарной кислоты, приведенный на рис. II.35.

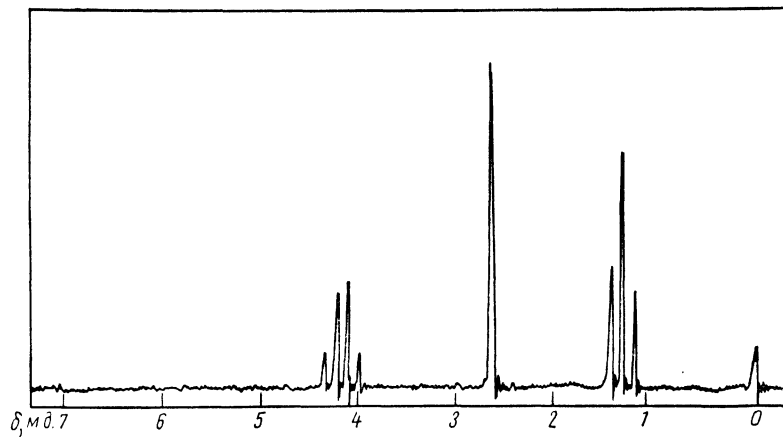


Рис. II.35

49. На рис. II.36 приведен ПМР-спектр бензилацетата. Сделайте сопоставление сигналов.

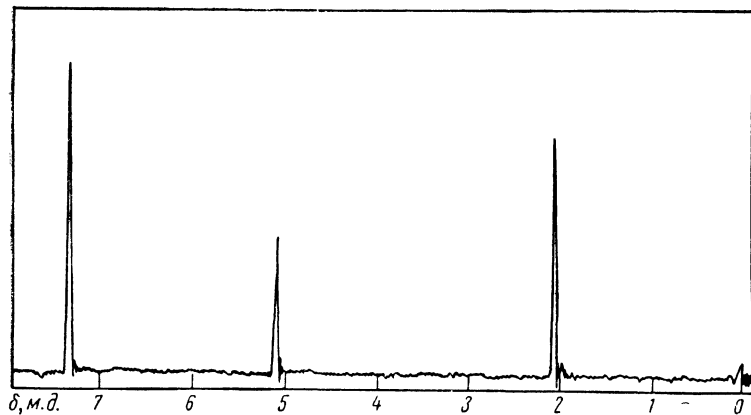


Рис. II.36

50. Проведите сопоставление ПМР-спектра (рис. II.37) со структурой соединения $(C_6H_5)_3SiOC_2H_5$.

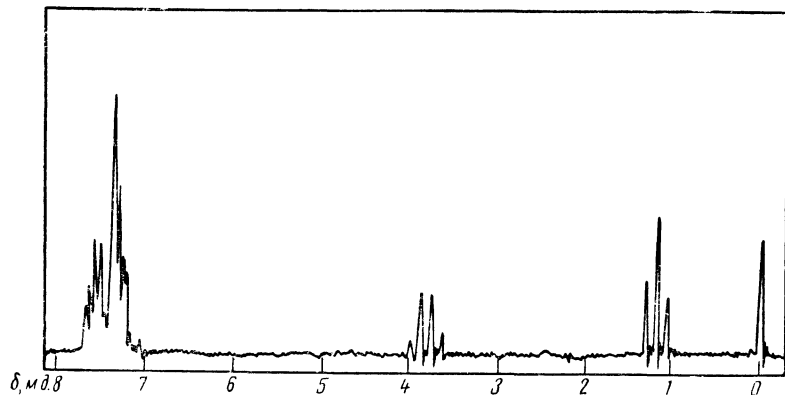


Рис. II.37

51. Сопоставьте спектр ПМР (рис. II.38) со строением соединения

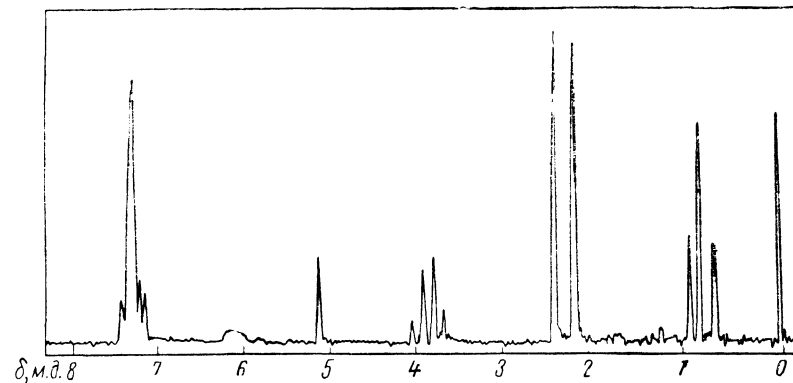
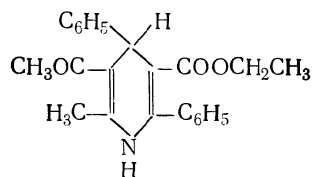


Рис. II.38

52. Сопоставьте спектр ПМР (рис. II.39) со структурой соединения $C_6H_5CH_2CH_2NHCOCH_3$.

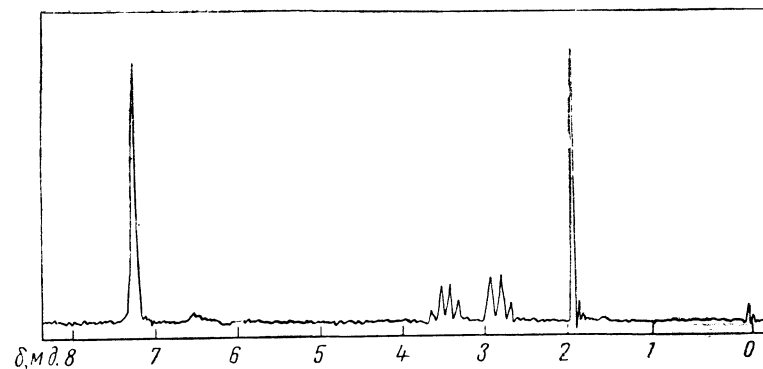
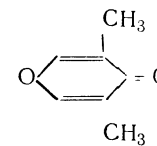


Рис. II.39

53. Сделайте отнесение сигналов в спектре ПМР (рис. II.40) соединения



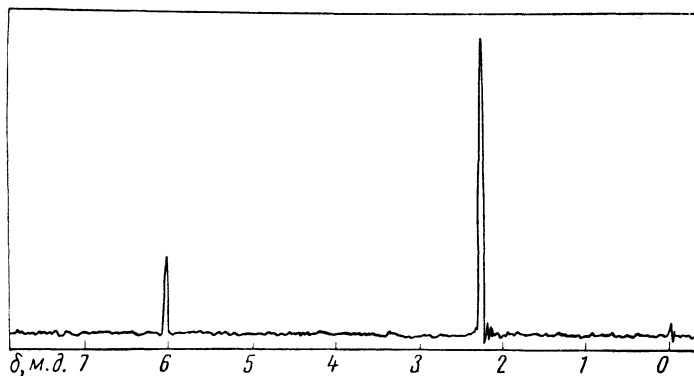


Рис. II.40

54. Какому из изомеров хлорпентана принадлежит спектр, изображенный на рис. II.41?

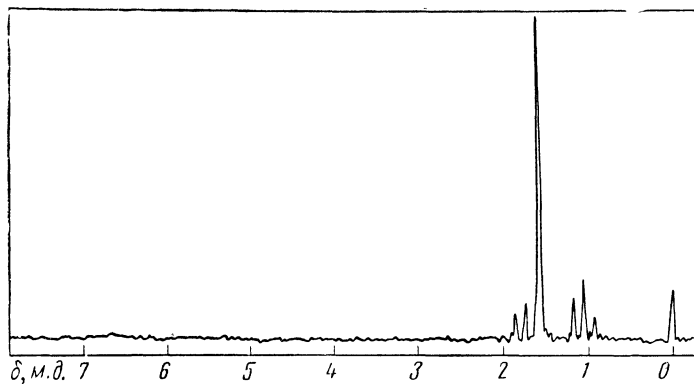


Рис. II.41

55. На рис. II.42 приведен спектр одного из изомеров кислоты $C_3H_6BrCOOH$. Какой это изомер?

56. Какому из изомеров бромистого бутила принадлежит спектр ПМР, приведенный на рис. II.43?

57. Какому из изомеров дихлорпропана принадлежит спектр ПМР, приведенный на рис. II.44?

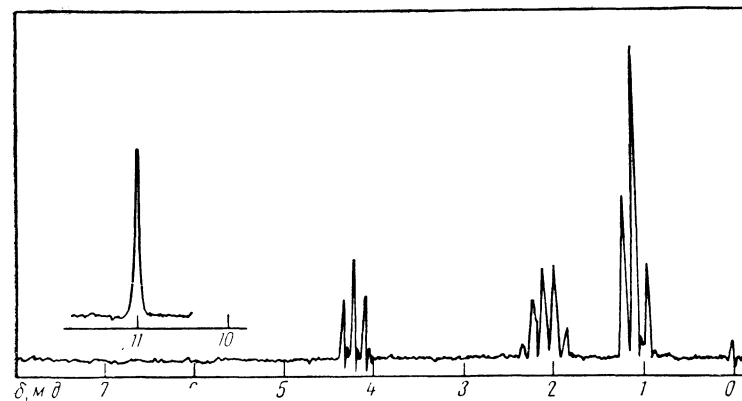


Рис. II.42

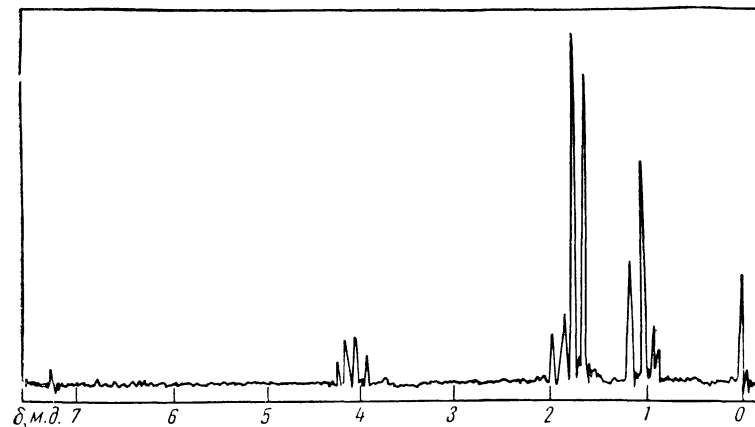


Рис. II.43

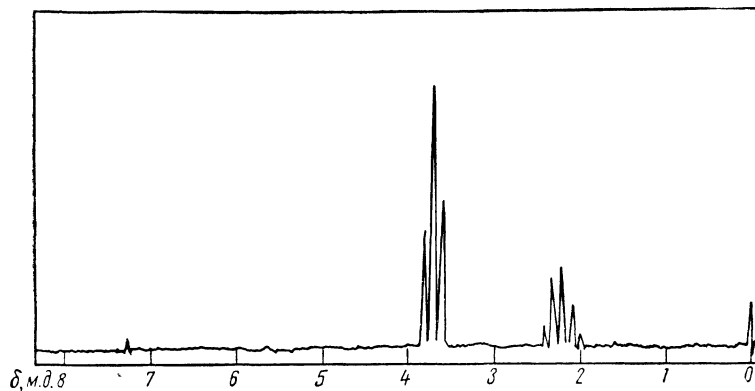


Рис. II.44

58. По спектру ПМР (рис. II.45) определите структуру соединения $C_2H_3Cl_3$.

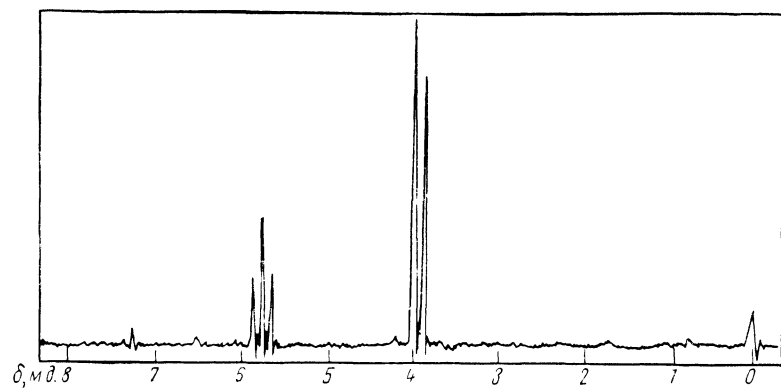


Рис. II.45

59. Определите строение соединения $C_2H_4Br_2$, спектр которого приведен на рис. II.46.

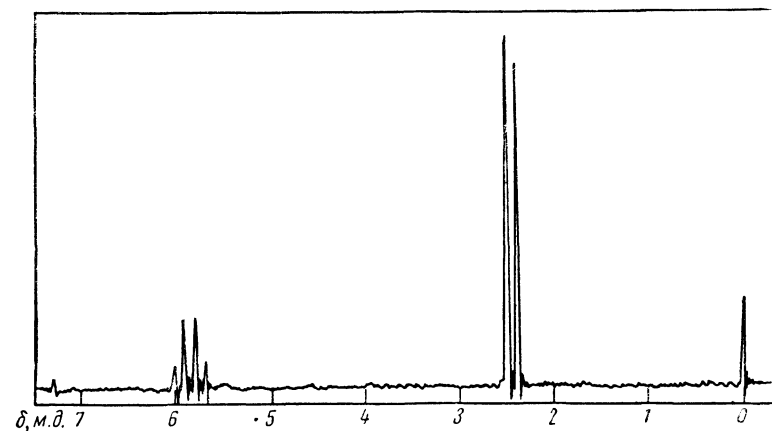


Рис. II.46

60. Определите структуру соединения C_3H_5ON по спектру ПМР, приведенному на рис. II.47.

61. По приведенному спектру ПМР соединения $C_3H_5ClO_2$ (рис. II.48) определите его строение.

62. Как построено соединение C_3H_8S , спектр ПМР которого приведен на рис. II.49.

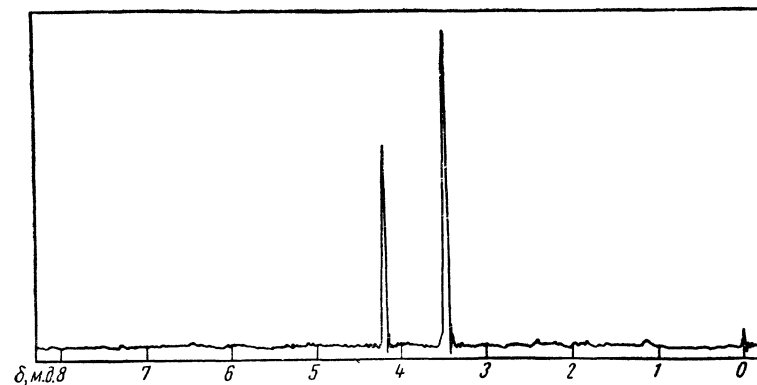


Рис. II.47

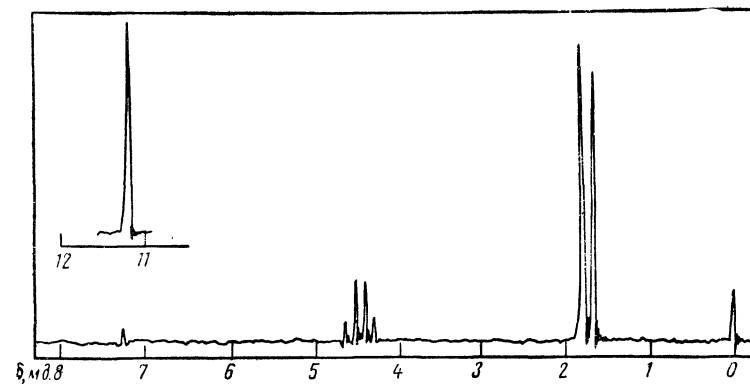


Рис. II.48

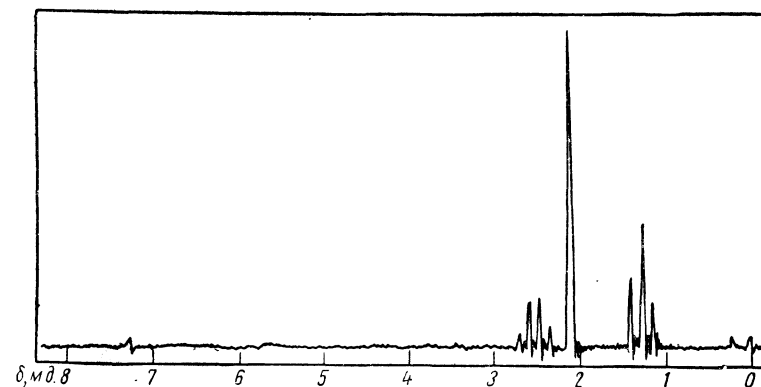


Рис. II.49

63. Напишите структурную формулу соединения $C_3H_4Cl_2$, спектр которого приведен на рис. II.50.

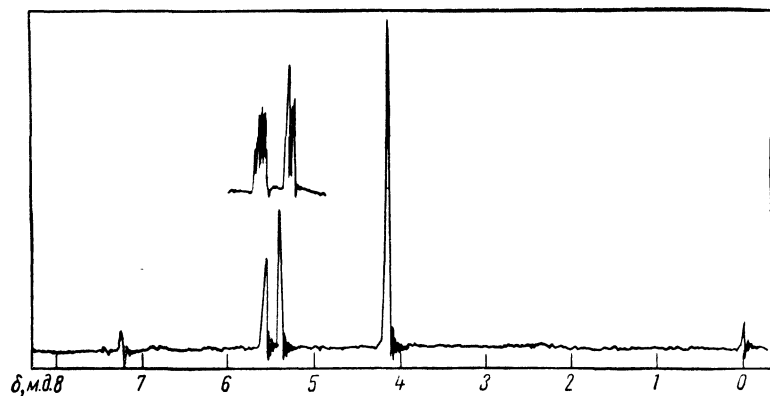


Рис. II.50

64. Спектр соединения $C_6H_{12}O_2$ приведен на рис. II.51. Определите строение этого соединения.

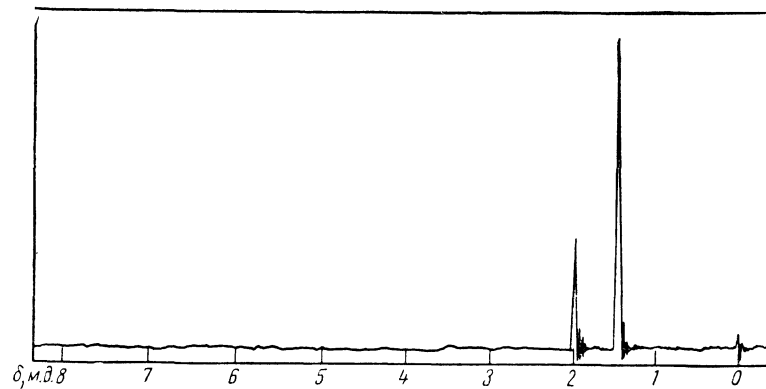


Рис. II.51

65. Как построено соединение $C_7H_{12}O_4$, спектр которого приведен на рис. II.52?

66. Определите строение соединения $C_4H_8O_3$, спектр которого изображен на рис. II.53.

67. По приведенному на рис. II.54 спектру ПМР определите строение соединения $C_7H_8N_2O_2$.

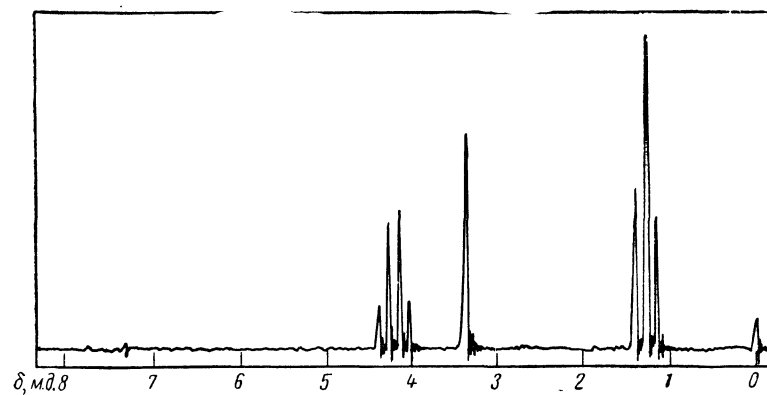


Рис. II.52

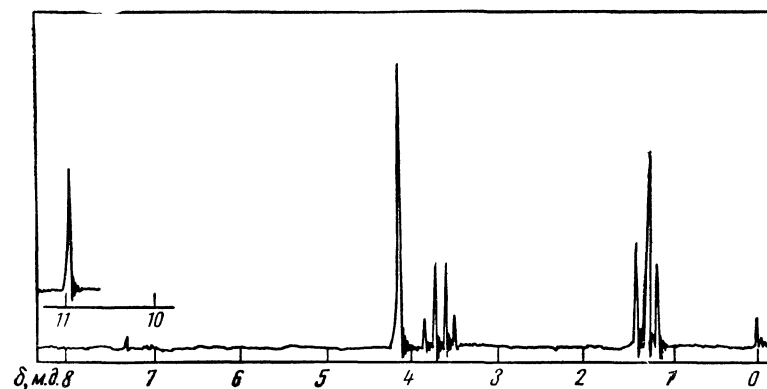


Рис. II.53

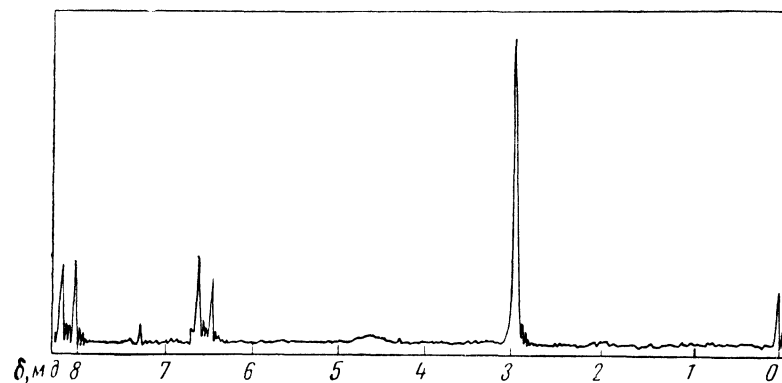


Рис. II.54

68. На рис. II.55 приведен спектр ПМР соединения $C_8H_7ClO_3$. Определите его строение.

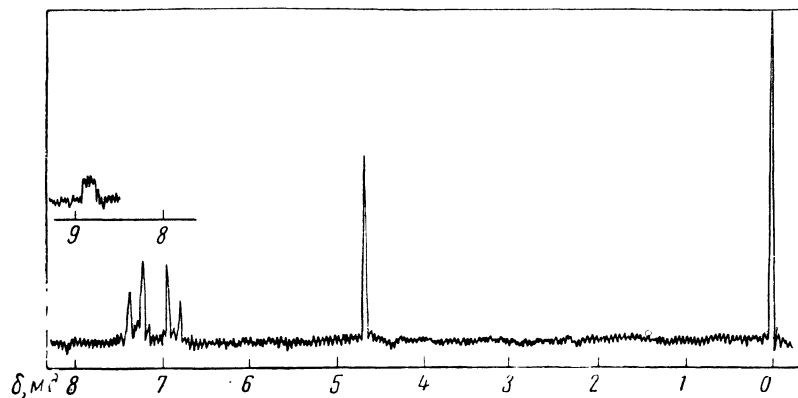


Рис. II.55

69. Сопоставьте спектр ПМР, приведенный на рис. II.56 со строением соединения

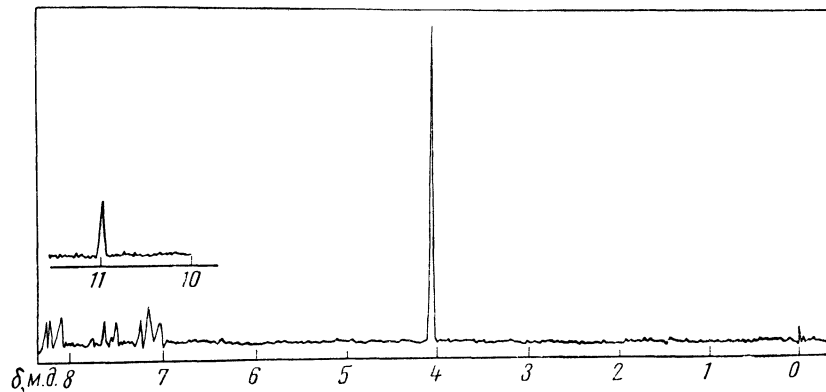
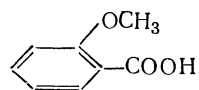


Рис. II.56

70. Выскажите предположение о структуре соединения C_8H_9FO по его спектру (рис. II.57).

71. Определите структуру соединения $C_8H_{11}N$ по приведенному на рис. II.58 спектру ПМР.

72. Напишите структурную формулу соединения $C_8H_{11}NO$, спектр которого приведен на рис. II.59.

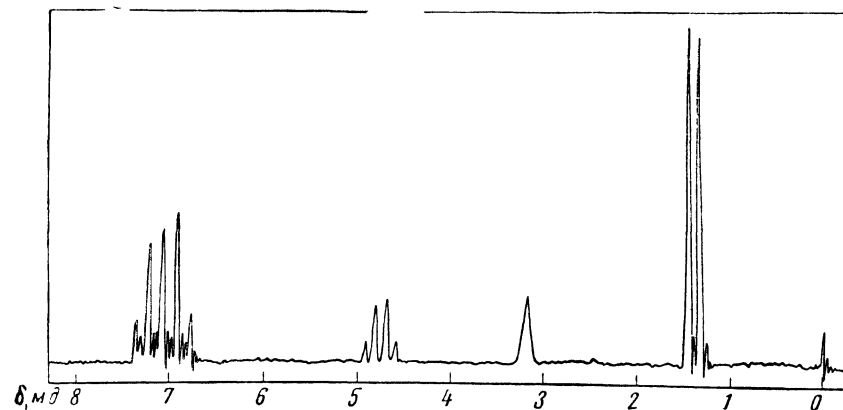


Рис. II.57

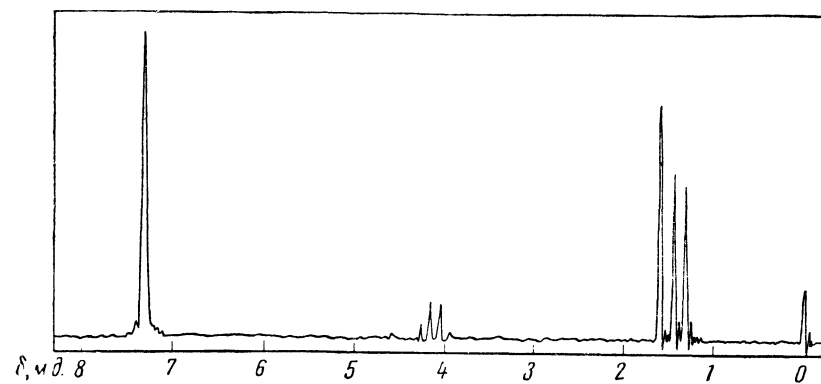


Рис. II.58

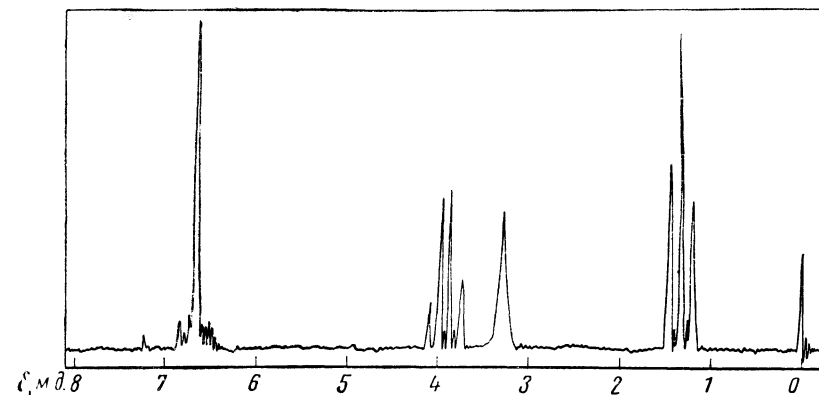


Рис. II.59

73. Выскажите предположение о структуре соединения $C_{10}H_{13}ON$ по его ПМР-спектру (рис. II.60).

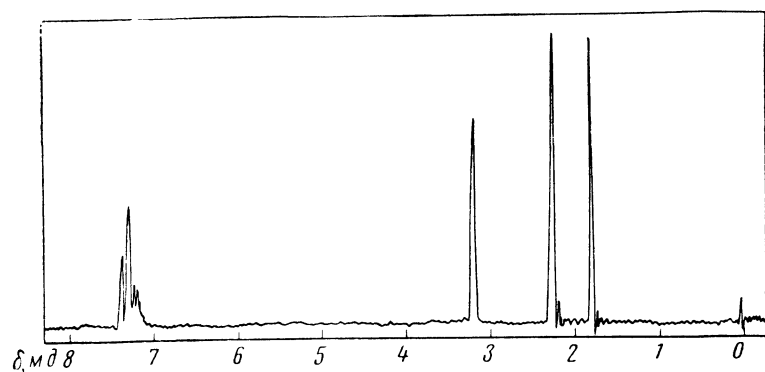


Рис. II.60

74. Определите строение соединения $C_{11}H_{16}$ по спектру ПМР, приведенному на рис. II.61.

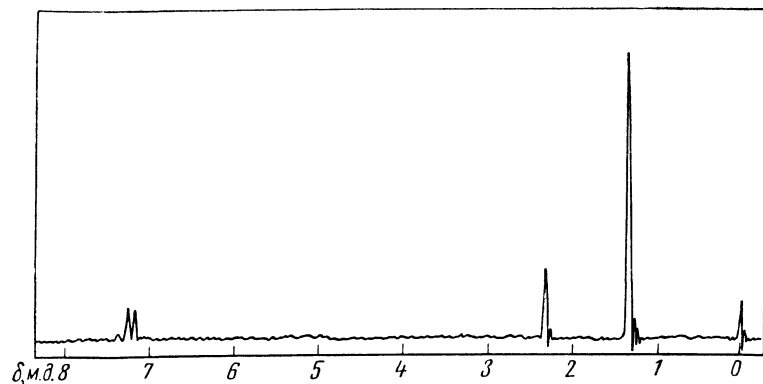
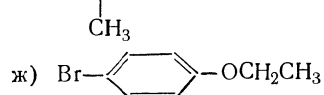
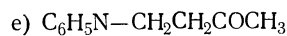
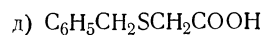
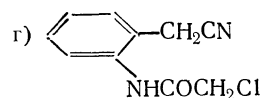
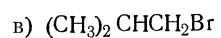
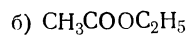
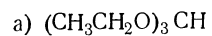


Рис. II.61

75. Какой спектр протонного магнитного резонанса можно ожидать для соединений:



76. Проведите сопоставление ИК- и ПМР-спектров (рис. II.62 и II.63) со структурой соединения $C_6H_5NHCOCH_2COCH_3$.

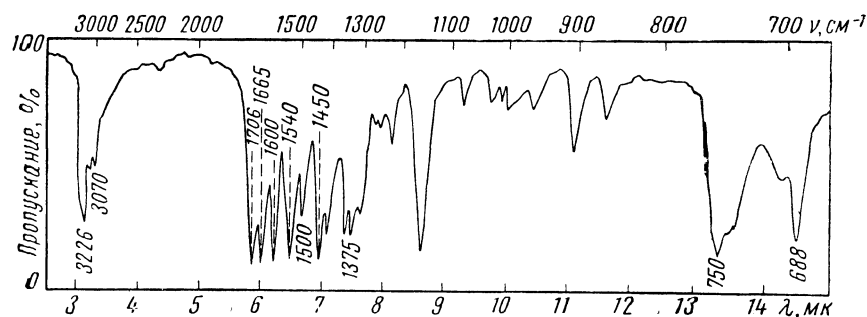


Рис. II.62

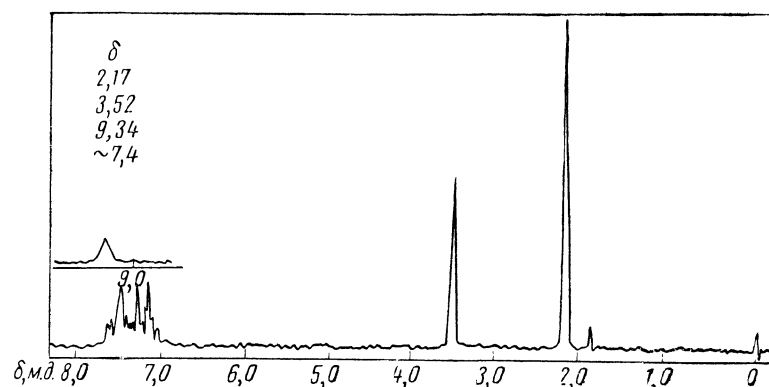


Рис. II.63

77. Сопоставьте ИК- и ПМР-спектры (рис. II.64 и II.65) со строением соединения $(CNCH_2CH_2)_2S$.

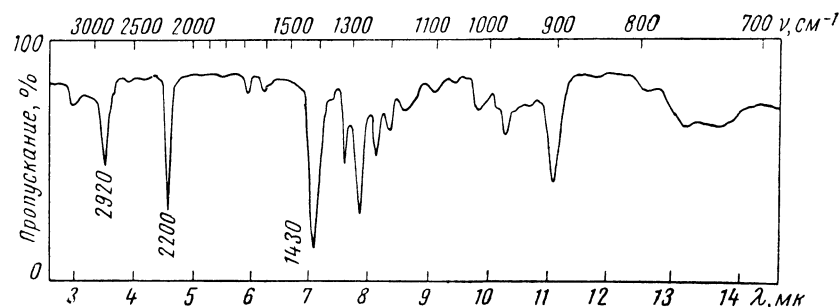


Рис. II.64

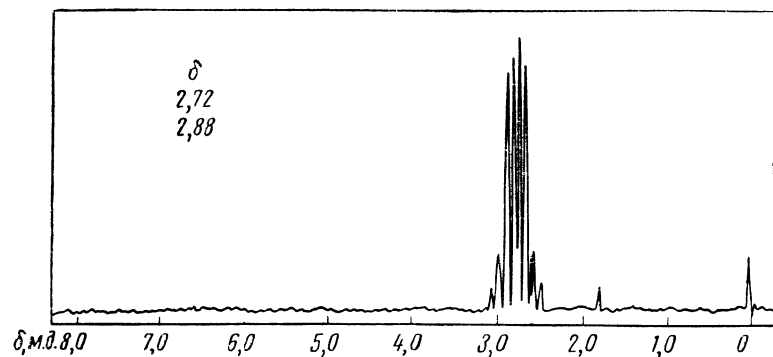


Рис. II.65

78. Спектр ПМР соединения $C_4H_5NO_2$ приведен на рис. II.66. В ИК-спектре этого соединения имеются полосы 1740 и 2240 см^{-1} . Определите его строение.

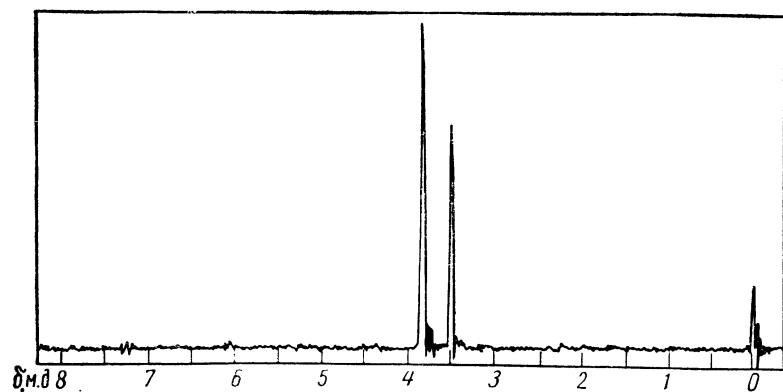


Рис. II.66

79. На рисунке II.67 приведен спектр ПМР соединения $C_4H_7BrO_2$. В ИК-спектре это соединение имеет широкую полосу поглощения при $3100\text{—}2800\text{ см}^{-1}$ и интенсивный пик при 1720 см^{-1} . Определите структуру соединения.

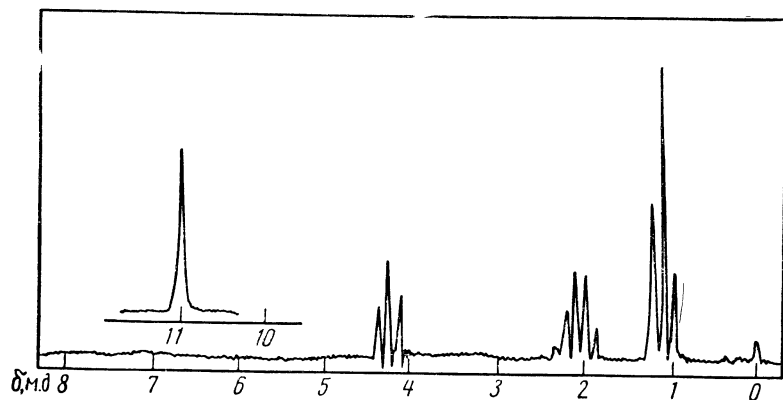


Рис. II.67

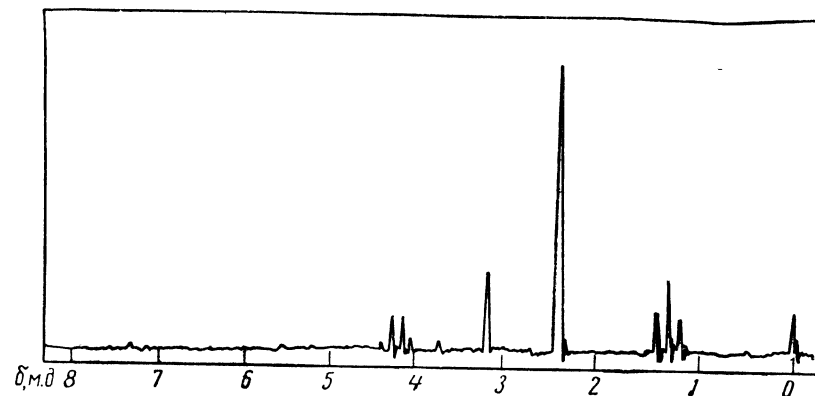


Рис. II.68

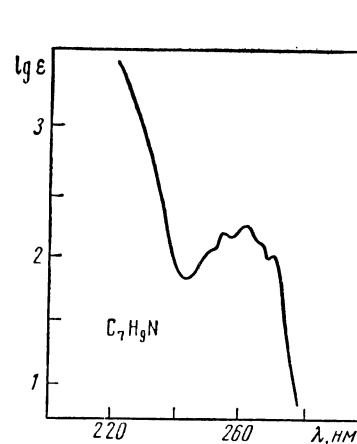


Рис. II.69

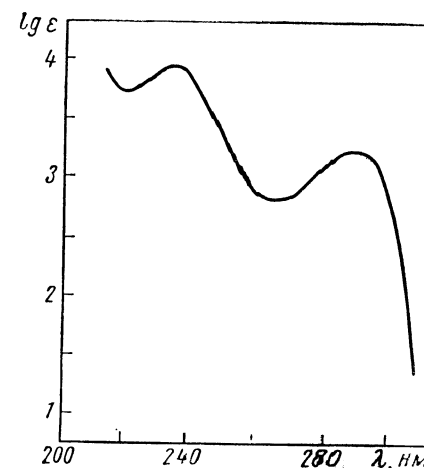


Рис. II.70

80. Определите структуру соединения $C_6H_{13}NO_2$ (спектр ПМР — рис. II.68); в ИК-спектре полоса при 1735 см^{-1} .

81. Определите строение соединения C_7H_9N . В ИК-спектре имеются полосы при 3480 и 3390 см^{-1} ; УФ-спектр дан на рис. II.69.

82. В ИК-спектре соединения состава C_7H_9N имеются резкие полосы поглощения в области $3500\text{—}3300\text{ см}^{-1}$. УФ-спектр приведен на рис. II.70. Определите структуру соединения.

83. К какому классу относятся соединения C_4H_8O , если первое имеет полосу при 1710 см^{-1} и в УФ поглощает при 280 нм ($\lg \epsilon = 1.2$), а второе — полосу при 1732 см^{-1} и поглощение при 292 нм ($\lg \epsilon = 1.4$).

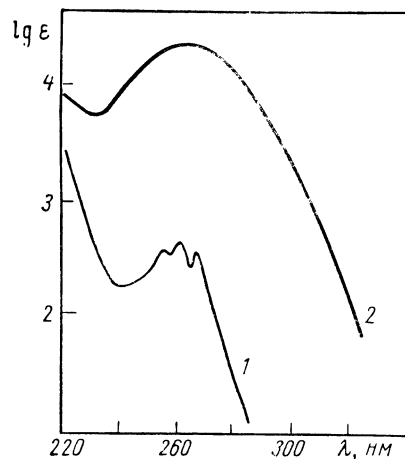


Рис. 11.71

85. Два соединения, имеющие одинаковую брутто-формулу $C_7H_{12}O$, различаются по своим спектральным характеристикам: для первого соединения в ИК-спектре наблюдаются интенсивная полоса поглощения при 1718 см^{-1} и полоса средней интенсивности при 1630 см^{-1} , в его УФ-спектре проявляется одна полоса поглощения низкой интенсивности при 280 нм с $\lg \epsilon = 1,2$. Для второго соединения в ИК-спектре наблюдаются две интенсивные полосы поглощения при 1600 и 1670 см^{-1} , в его УФ-спектре имеются две полосы поглощения — интенсивная с $\lg \epsilon = 4,1$ и $\lambda_{\text{макс}} = 220\text{ нм}$ и низкоинтенсивная полоса при 300 нм с $\lg \epsilon = 1,5$. Какие изменения в строении соединения могут вызвать указанные различия в ИК- и УФ-спектрах?

86. Вещество с брутто-формулой C_9H_{10} , имеющее в ИК-спектре поглощение средней интенсивности при 1650 см^{-1} и обладающее УФ-спектром поглощения, представленным на рис. 11.72, 1, под действием УФ-облучения изомеризовалось. При этом в ИК-спектре исчезла полоса при 1650 см^{-1} и появилось интенсивное поглощение при 1625 см^{-1} . УФ-спектр также существенно изменился: полоса поглощения сместилась bathochromно, а ее интенсивность увеличилась (рис. 11.72, 2). Определите строение исходного соединения и продукта его изомеризации.

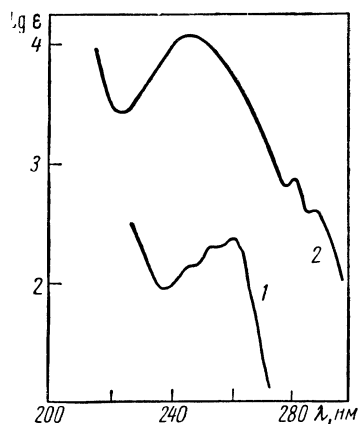


Рис. 11.72

84. Два соединения имеют состав $C_{14}H_{14}O$. В ИК-спектрах обоих отсутствует поглощение в области $3200\text{—}3600\text{ см}^{-1}$ и имеются полосы в областях 3000 , 1600 и 1500 см^{-1} , характерные для ароматического кольца. УФ-спектры исследуемых соединений (рис. 11.71) различаются между собой. Определите возможное строение этих соединений.

Какие дополнительные спектральные характеристики можно привести для подтверждения предложенной структуры?

87. Спектры двух соединений, имеющих брутто-формулу C_7H_8O , отличаются поглощением в области $3400\text{—}3600\text{ см}^{-1}$: первое не поглощает в этой области, второе имеет поглощение, характер которого изменяется с изменением концентрации вещества в растворе CCl_4 . УФ-спектры этих веществ представлены на рис. 11.73. Определите структуру соединений и укажите, каков характер ИК-спектра этих веществ в области валентных колебаний $C-H$.

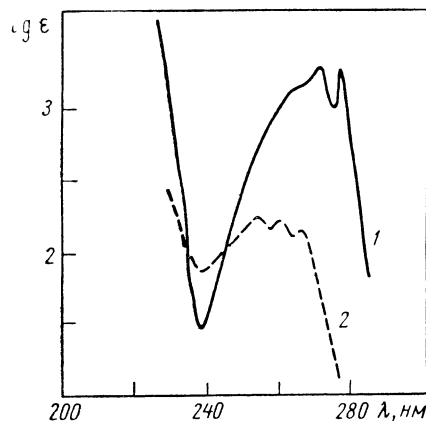


Рис. 11.73

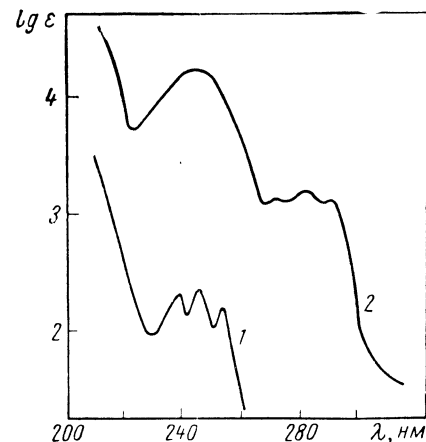


Рис. 11.74

88. Два соединения, имеющие брутто-формулу $C_9H_{10}O_2$, обладают различными спектральными характеристиками. Первое соединение имеет в ИК-спектре полосу при 1720 см^{-1} ; УФ-спектр его изображен на рис. 11.74, 1. У второго в ИК-спектре проявляется интенсивная полоса поглощения при 1680 см^{-1} и ему соответствует УФ-спектр, представленный на рис.

11.74, 2. В ИК-спектрах обоих соединений имеется широкая полоса поглощения в области $3300\text{—}2500\text{ см}^{-1}$. Выскажите предположение о структуре соединений и укажите, какие еще различия имеются в ИК-спектрах исследуемых веществ.

89. Определите строение двух соединений, если известно, что они имеют брутто-формулу $C_8H_8O_2$ и УФ-спектры, изображенные на рис. 11.75. В ИК-спектре первого соединения имеется полоса при 1718 см^{-1} и широкая полоса в области 3000 см^{-1} . В ИК-спектре второго соединения имеется полоса 1720 см^{-1} . Поглощение в области 3000 см^{-1} отсутствует.

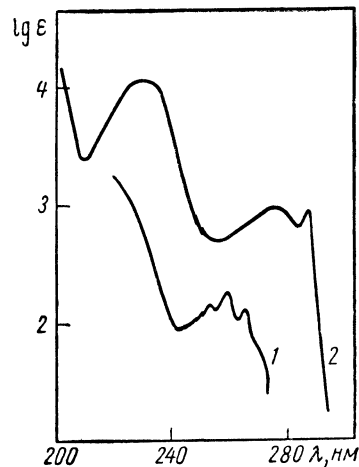


Рис. 11.75

90. На рис. II.76 приведены спектры пропенилбензола $C_6H_5CH=CHCH_3$, аллилбензола $C_6H_5CH_2CH=CH_2$ и 1-фенилпентадиена-1,3 $C_6H_5CH=CH-CH=CH-CH_3$. Какому соединению принадлежит каждая кривая поглощения?

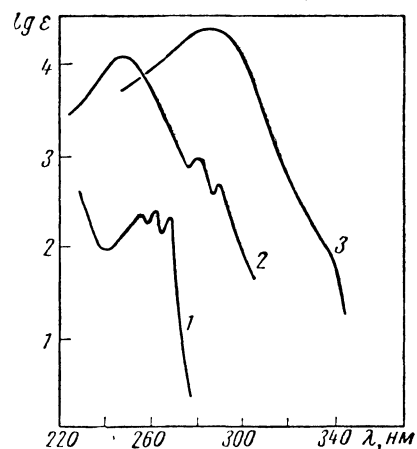


Рис. II.76

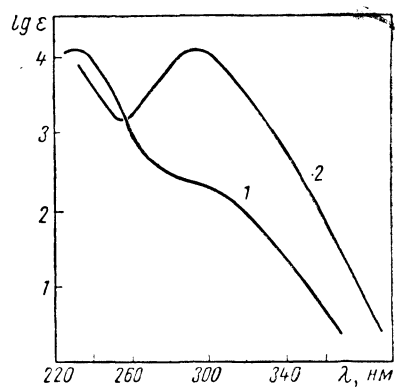
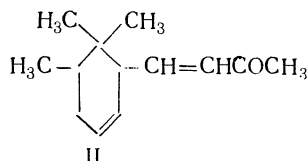
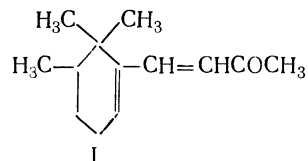


Рис. II.77

91. Какая из кривых, приведенных на рис. II.77, принадлежит α-ирону (I) и β-ирону (II)?



92. На рис. II.78 приведены спектры β-нафтола и 2-нафтилкарбинола. Какому соединению принадлежит каждая кривая?

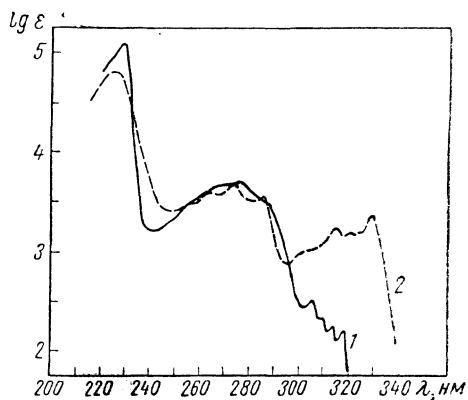


Рис. II.78

93. Объясните различия в приведенных на рис. II.79 спектрах следующих диметилдифенилов:

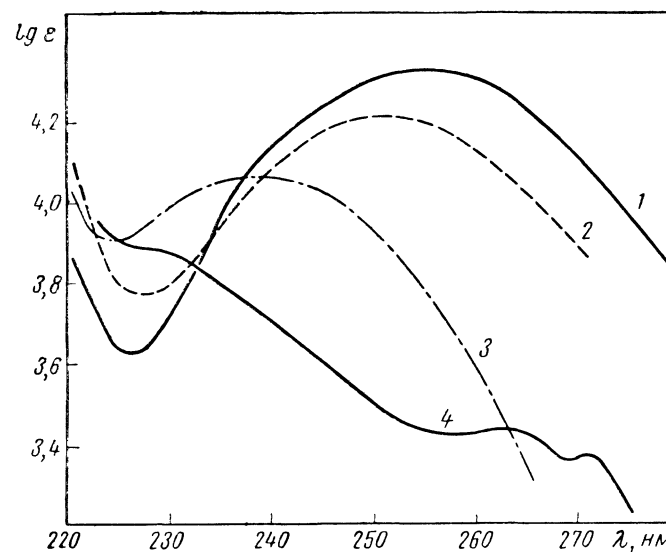
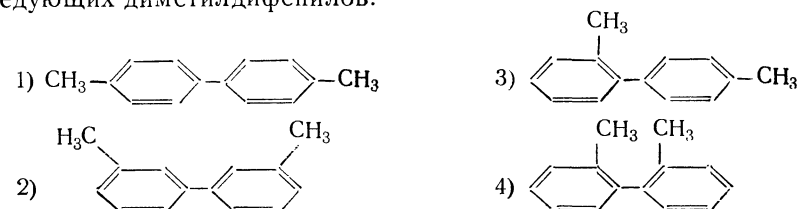


Рис. II.79

94. На рис. II.80 приведены спектры 2,2'-дихлордифенила и 1,4'-дихлордифенила. Какому соединению соответствует каждая кривая?

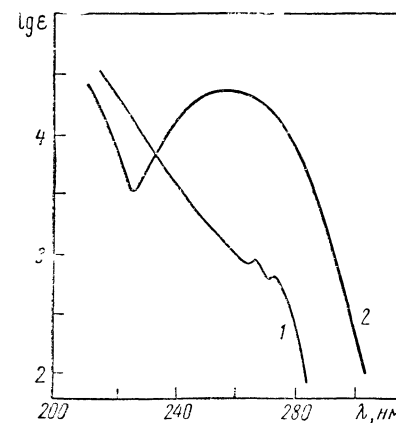


Рис. II.80

95. На рис. II.81 приведены спектры поглощения фенола в растворе гексана, спирта и в щелочном растворе. Определите, какому растворителю соответствует каждая кривая.

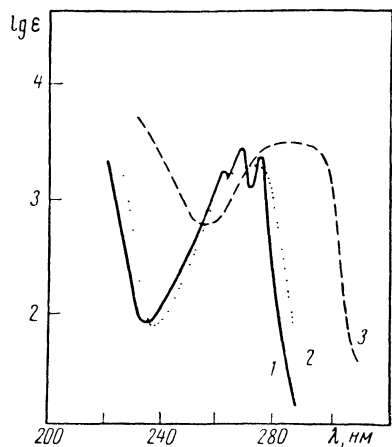


Рис. II.81

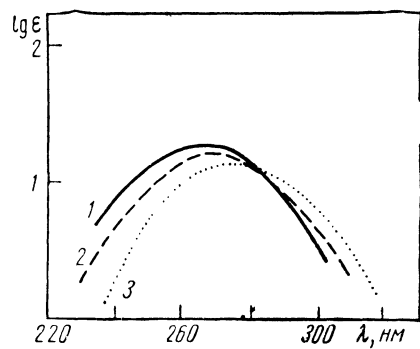


Рис. II.82

96. Спектр ацетона (рис. II.82) снят в растворе гексана, этанола и воды. Какому растворителю соответствует каждая кривая?

97. Спектр пиразина изменяется при изменении полярности растворителя, как это показано на рис. II.83. Определите, какой спектр соответствует раствору в воде и в циклогексане, и объясните происходящие изменения.

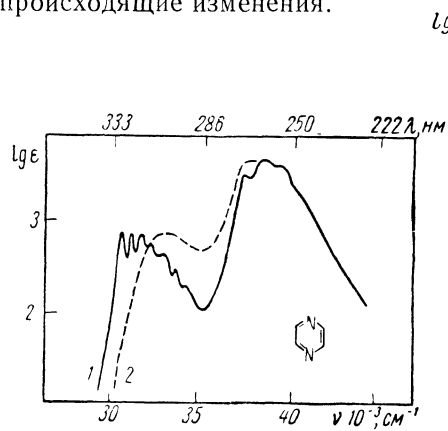


Рис. II.83

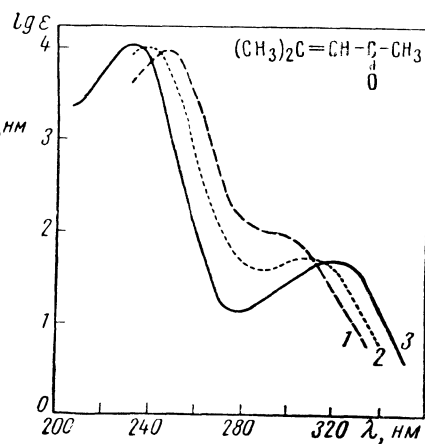


Рис. II.84

98. Определите, какому из растворителей: гексану, спирту или воде — соответствует каждая кривая поглощения окиси мезитила, представленная на рис. II.84. Объясните происходящие в спектре изменения.

99. На рис. II.85 приведены спектры α-нафтиламина в спиртовом растворе и в кислом водно-спиртовом растворе. Какому растворителю соответствует каждая кривая?

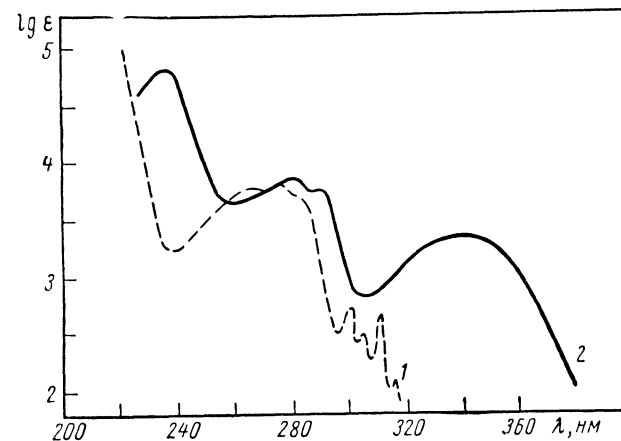


Рис. II.85

100. *o*-Аминофенол в спиртовых растворах имеет спектр, приведенный на рис. II.86, 1. На том же рисунке даны спектры *o*-аминофенола в кислом и щелочном растворах. Определите, какому растворителю соответствует каждая кривая поглощения.

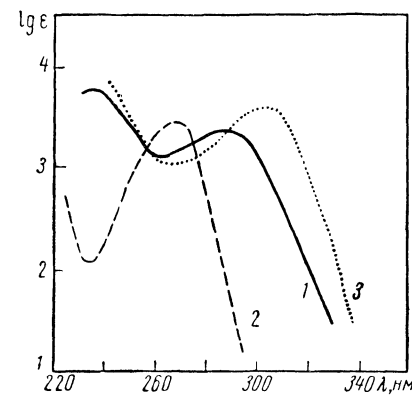


Рис. II.86

101. 2-Аминоантрацен в спиртовом растворе имеет спектр, представленный на рис. II.87, 1. В каком растворителе следует снять спектр аминоантрацена, чтобы получить кривую 2.

102. Объясните приведенные на рис. II.88, II.89 и II.90 УФ-, ИК- и ПМР-спектры винилацетата $\text{CH}_2=\text{CHOOSCH}_3$.

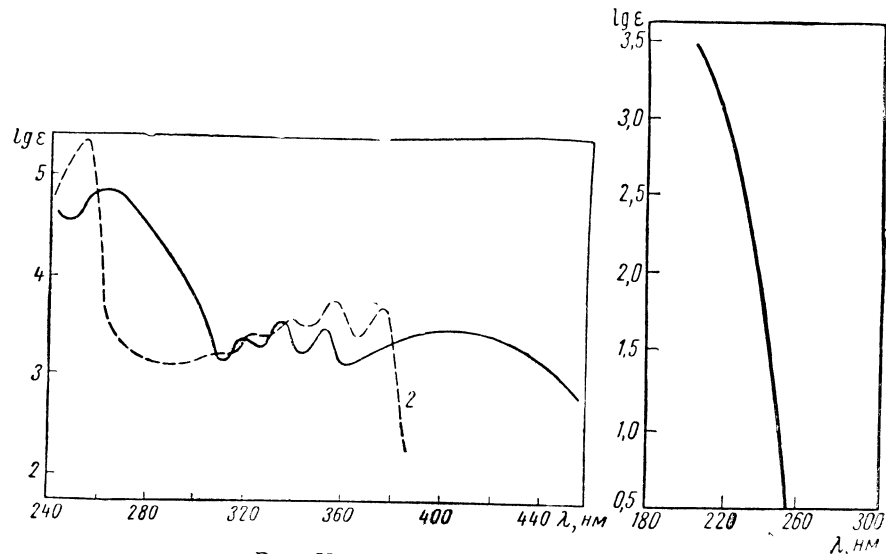


Рис. II.87

Рис. II.88

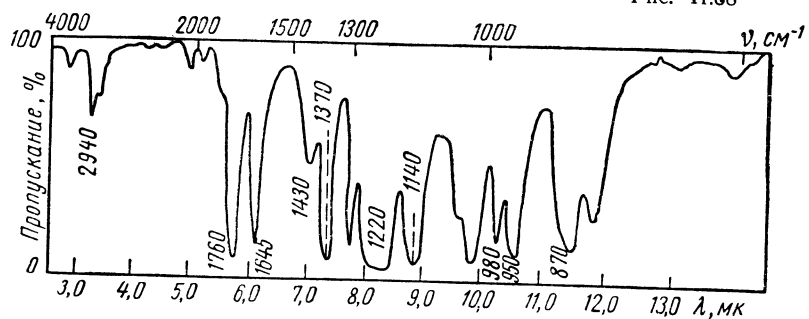


Рис. II.89

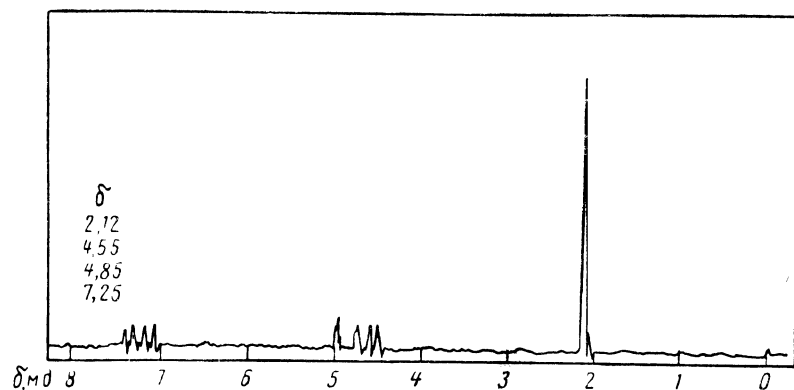


Рис. II.90

103. Объясните приведенные на рис. II.91, II.92 и II.93 УФ-, ИК- и ПМР-спектры N, N-диметилацетамида.

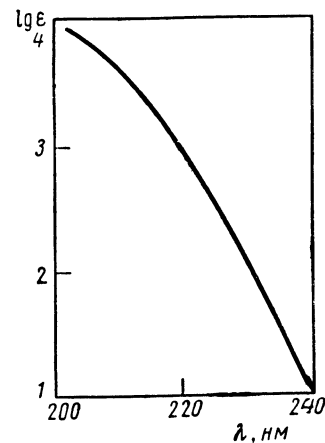


Рис. II.91

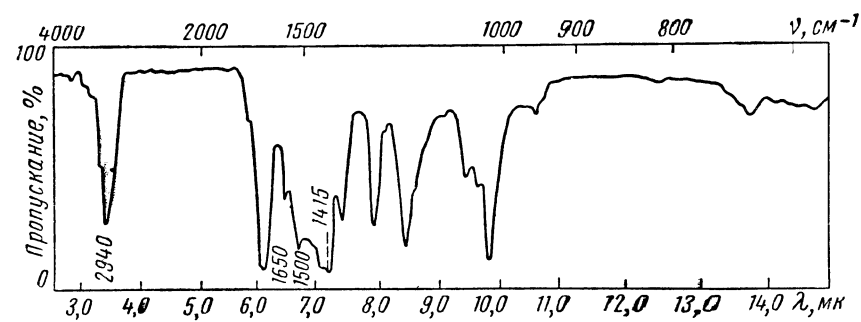


Рис. II.92

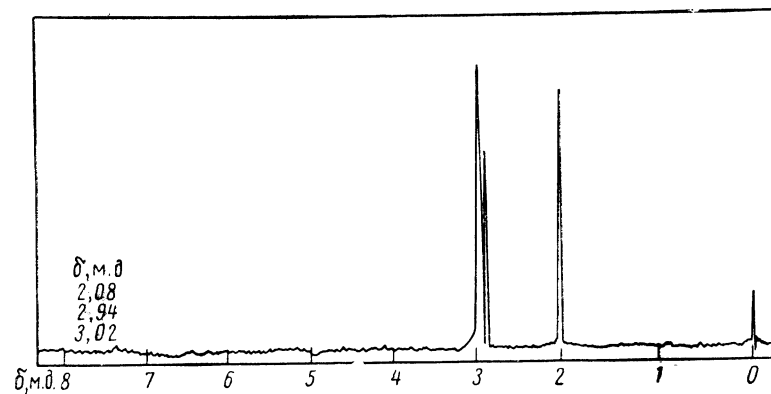


Рис. II.93

104. Дайте объяснение УФ-, ИК и ПМР-спектров фенацетина $n\text{-C}_2\text{H}_5\text{OC}_6\text{H}_4\text{NHCOCH}_3$ (рис. II.94, II.95, II.96).

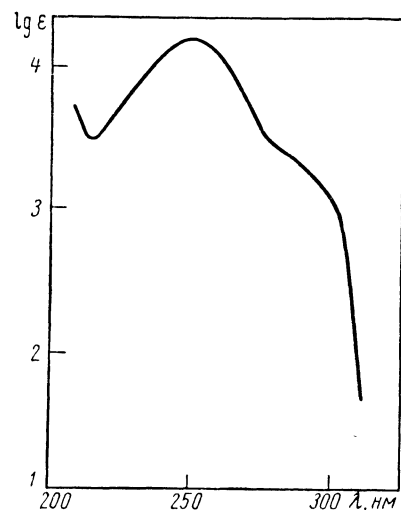


Рис. II.94

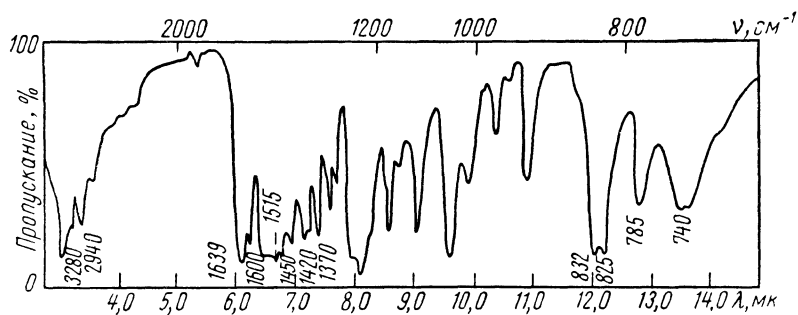


Рис. II.95

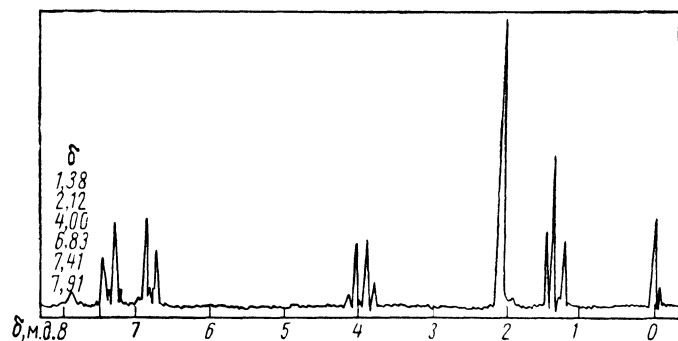


Рис. II.96

105. Соединение имеет формулу $\text{C}_{15}\text{H}_{14}\text{O}$; в его ИК-спектре обнаружена интенсивная полоса при 1710 см^{-1} и в УФ-спектре поглощение, характерное для бензольного кольца. Спектр ПМР приведен на рис. II.97. Определите структуру соединения.

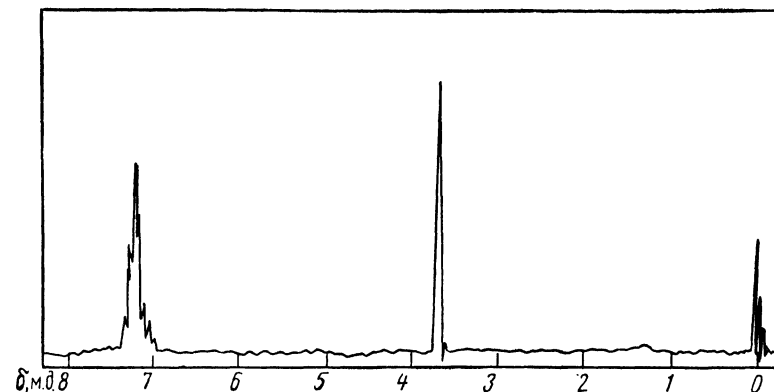


Рис. II.97

106. Раствор диизоамилдисульфида $[(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{S}]_2$ в этаноле имеет в УФ-области полосу поглощения с $\lambda_{\text{макс}} = 248\text{ нм}$ и $\lg \epsilon = 2,55$. ИК- и ПМР-спектры соединения приведены на рис. II.98 и II.99. Объясните приведенные спектральные данные.

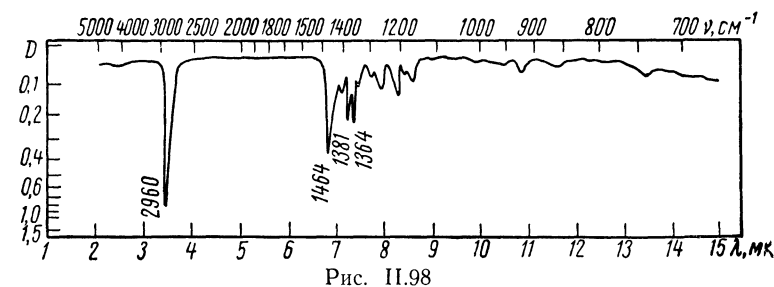


Рис. II.98

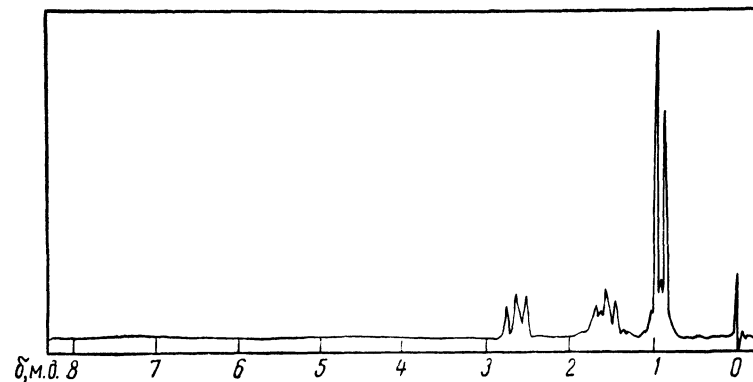


Рис. II.99

107. ИК- и ПМР-спектры соединения $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{SH}$ приведены на рис. II.100 и II.101. В УФ-спектре его раствора в этаноле наблюдается только перегиб при 232 нм с интенсивностью $\epsilon=136$. Сопоставьте спектральные свойства соединения с его строением.

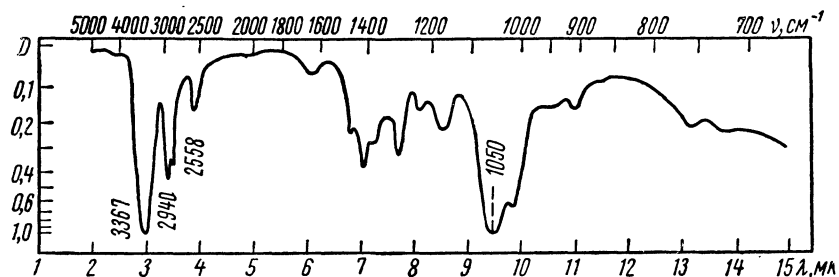


Рис. II.100

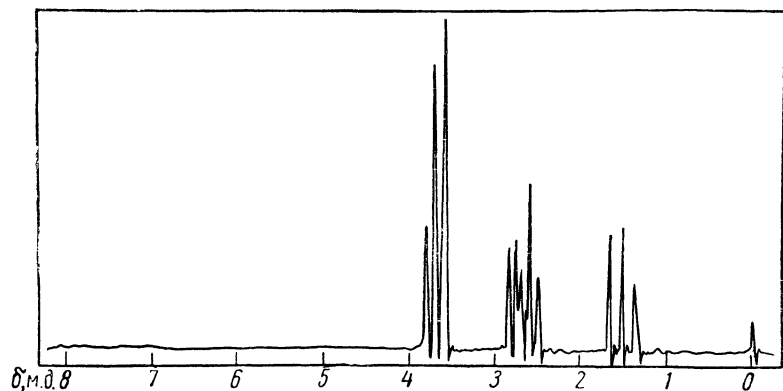


Рис. II.101

108. Дайте объяснение УФ-, ИК и ПМР-спектрам леволиновой кислоты. ИК- и ПМР-спектры приведены на рис. II.102, II.103. В ее УФ-спектре (раствор в этаноле) имеется полоса поглощения низкой интенсивности при 262 нм ($\lg \epsilon=1,5$).

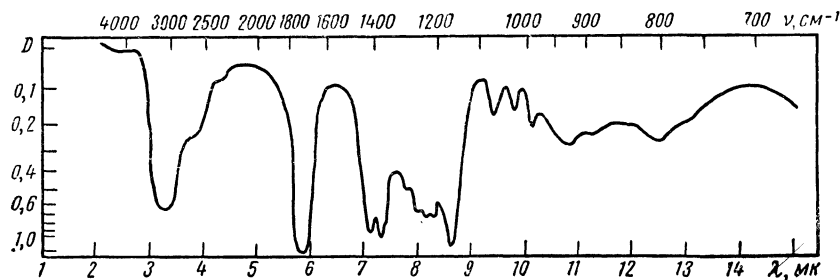


Рис. II.102

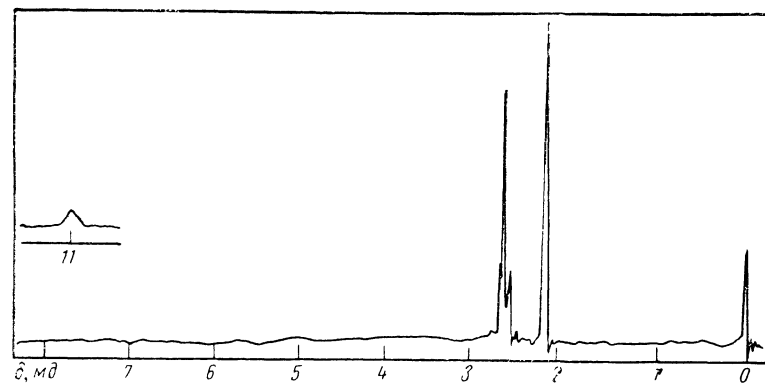


Рис. II.103

109. В УФ-спектре гептанового альдегида $\text{C}_6\text{H}_{13}\text{CHO}$ наблюдается поглощение малой интенсивности при 292 нм в растворе циклогексана ($\epsilon=23$). ИК- и ПМР-спектры его даны на рис. II.104 и II.105. Сопоставьте спектральные свойства соединения с его структурой.

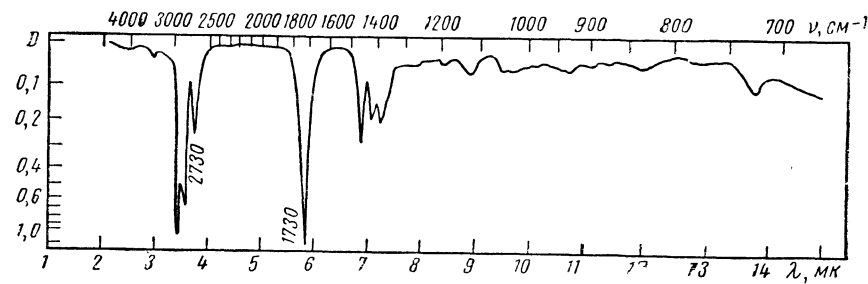


Рис. II.104

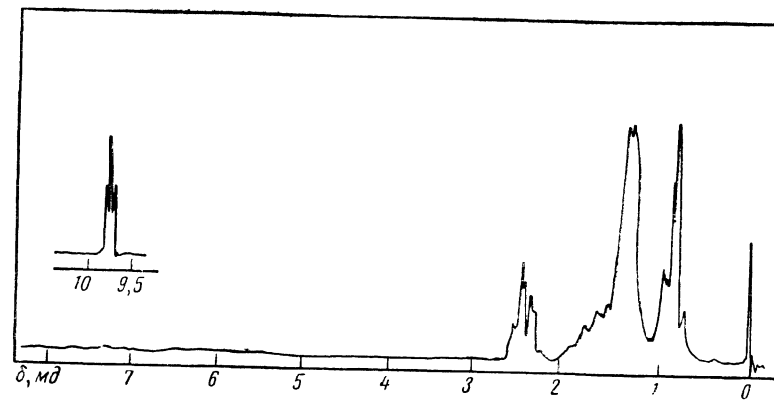


Рис. II.105

110. Проведите сопоставление ИК- и ПМР-спектров γ -валеро-
лактона (рис. II.106 и II.107) с его строением.

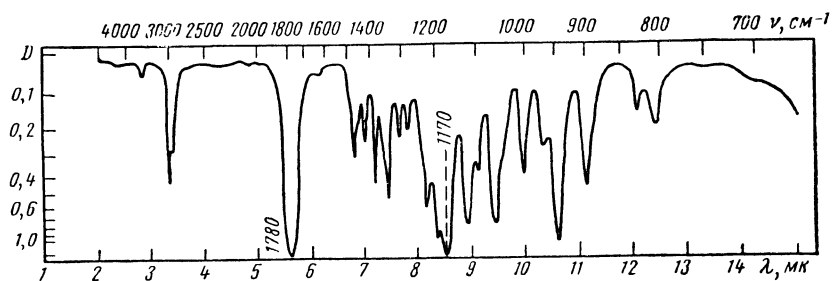


Рис. II.106

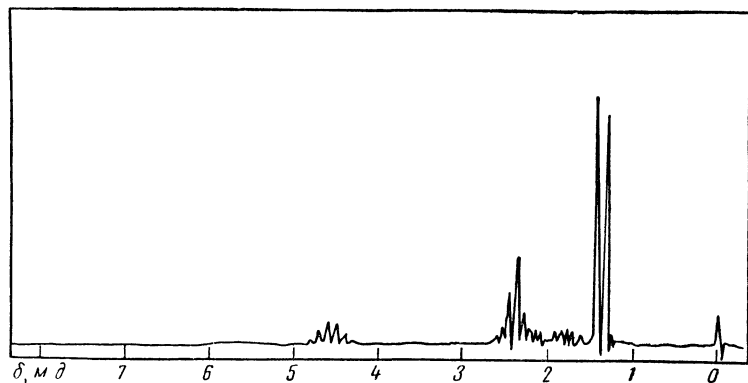


Рис. II.107

111. ПМР- и ИК-спектры 1,2,3-трихлорпропана представлены
на рис. II.108 и II.109. Сопоставьте приведенные спектры со строе-
нием соединения.

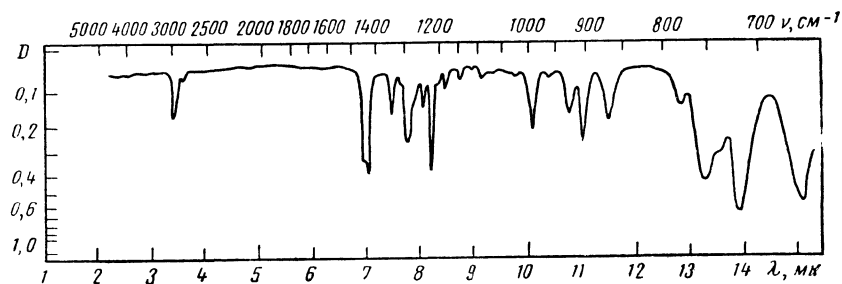


Рис. II.108

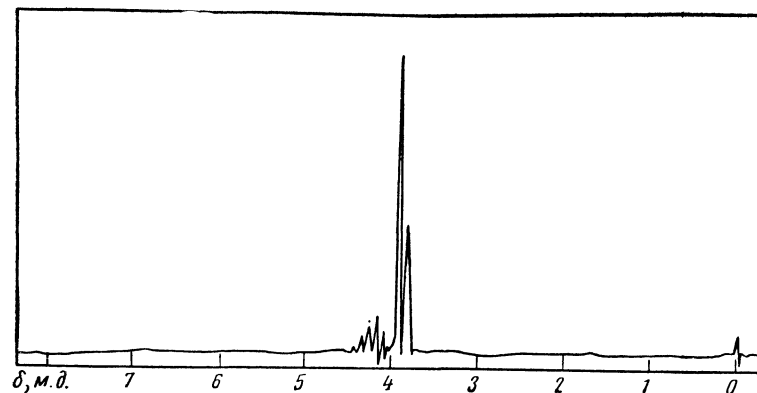


Рис. II.109

112. 4-Хлориндол имеет ИК- и ПМР-спектры, представленные
на рис. II.110 и II.111. Максимумы полос поглощения в УФ-спектре
находятся при 218 нм ($\lg \epsilon=4,61$), 272 нм ($\lg \epsilon=3,88$), 278 нм
($\lg \epsilon=3,89$) и 288 нм ($\lg \epsilon=3,77$). Сопоставьте спектральные дан-
ные со строением 4-хлориндола.

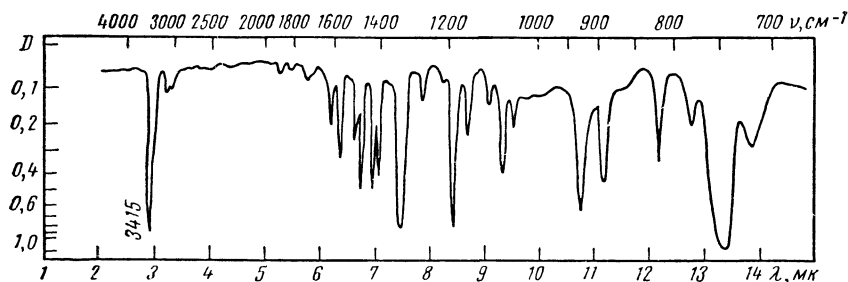


Рис. II.110

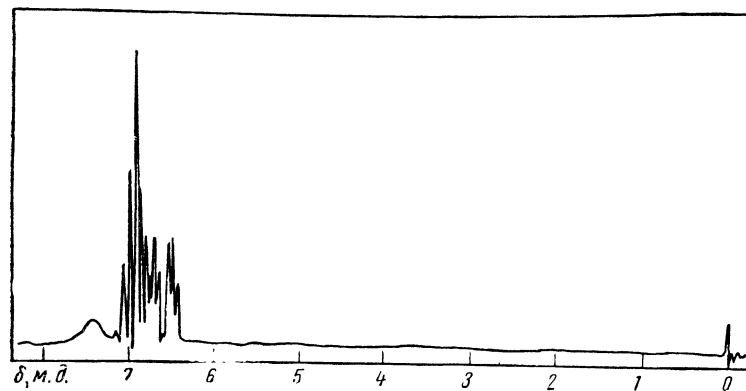


Рис. II.111

113. На рис. II.112, II.113 приведены ИК- и ПМР-спектры ϵ -капролактама $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHCO}$. В УФ-спектре соединения имеет поглощение в области 210–240 нм (в растворе этанола) без характерных максимумов. Дайте объяснение приведенным спектрам.

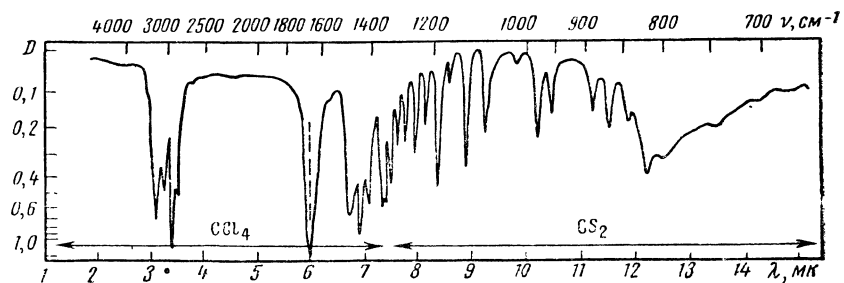


Рис. II.112

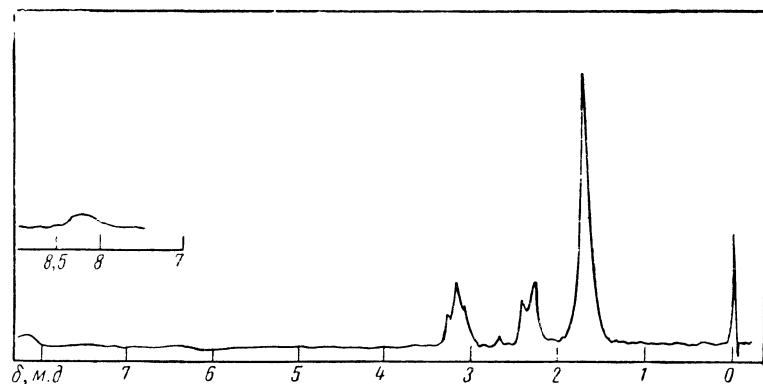


Рис. II.113

114. Определите структуру соединения $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$ по спектрам, приведенным на рис. II.114 (в растворе изооктана), II.115 и II.116.

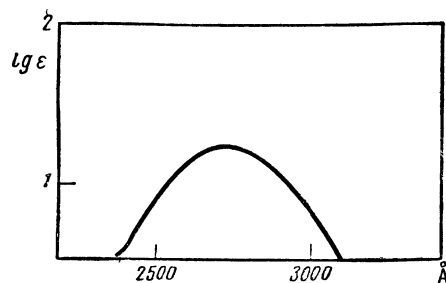


Рис. II.114

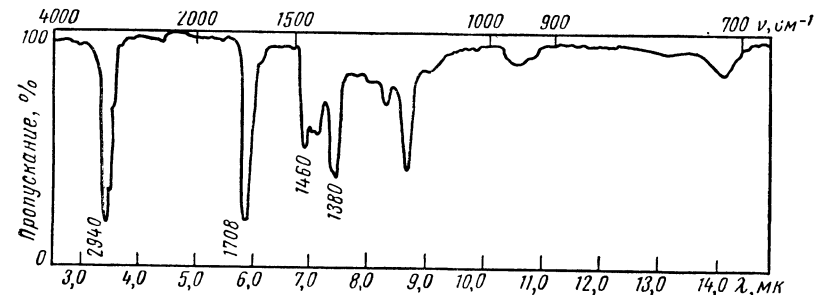


Рис. II.115

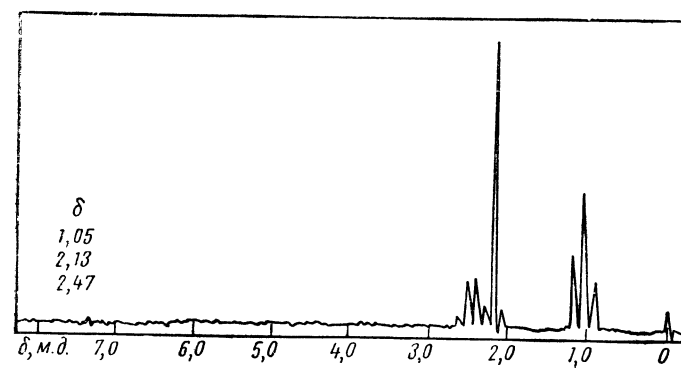


Рис. II.116

115. Определите строение органического соединения $\text{C}_4\text{H}_6\text{BrN}$, если оно имеет ИК- и ПМР-спектры, приведенные на рис. II.117 (жидкая пленка) и II.118, и известно, что в УФ-области не наблюдается максимумов поглощения.

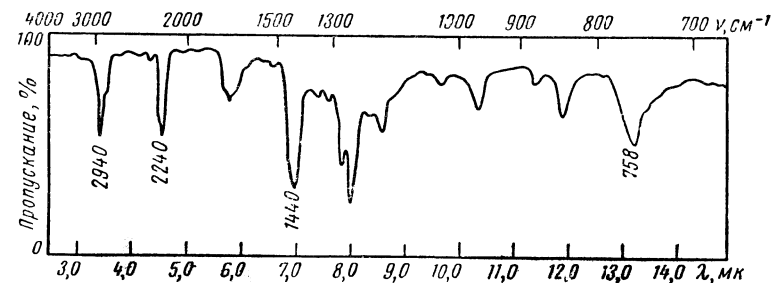


Рис. II.117

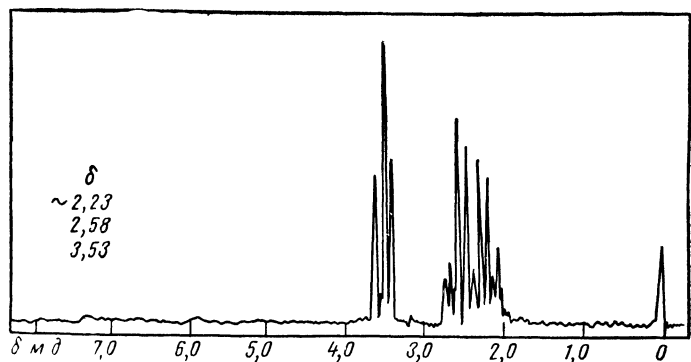


Рис. II.118

116. Соединение C_3H_8O не имеет поглощения в УФ-области. По ИК- и ПМР-спектрам (рис. II.119, жидкая пленка, II.120), определите его структуру.

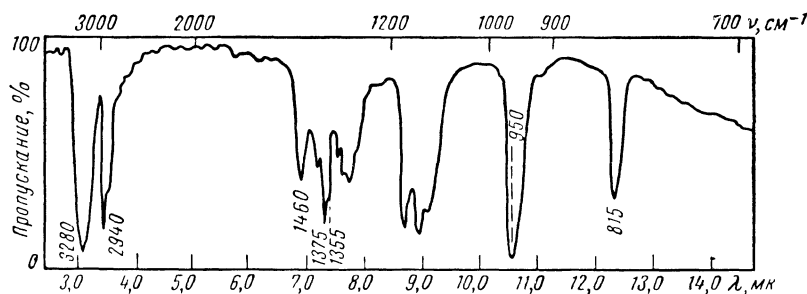


Рис. II.119

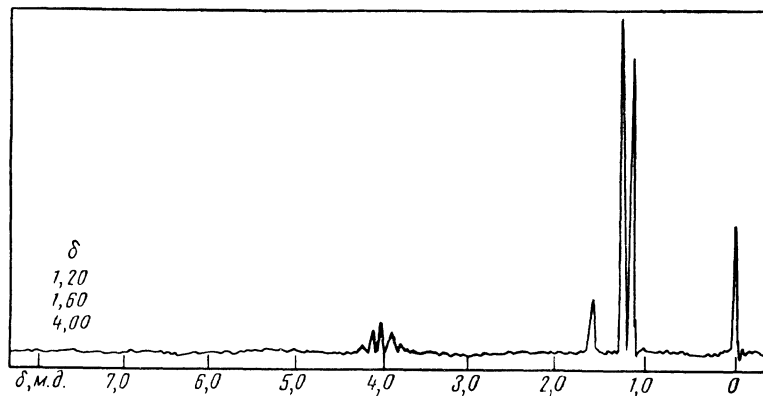


Рис. II.120

117. Соединение C_3H_8O прозрачно в УФ-области. Его ИК- и ПМР-спектры представлены на рис. II.121 (жидкая пленка), II.122. Установите его строение.

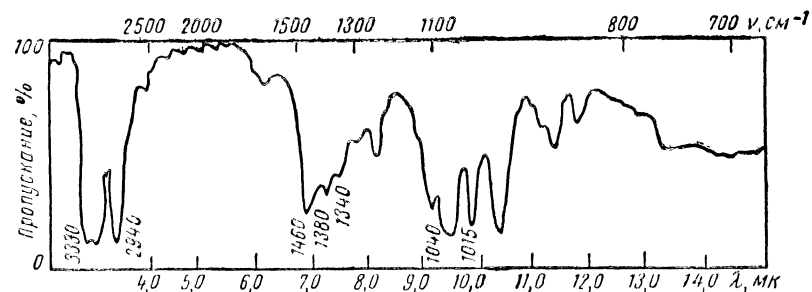


Рис. II.121

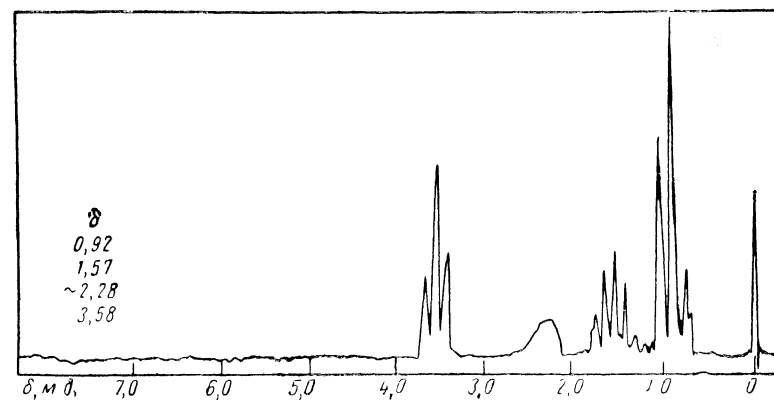


Рис. II.122

118. Соединение $C_3H_7O_2N$ имеет в растворе петролейного эфира низкоинтенсивную полосу поглощения в УФ-области с $\lambda_{\text{max}} = 280 \text{ нм}$ ($\lg \epsilon = 1,34$). Его ИК- и ПМР-спектры приведены на рис. II.123 (жидкая пленка) и II.124. Установите структурную формулу этого соединения.

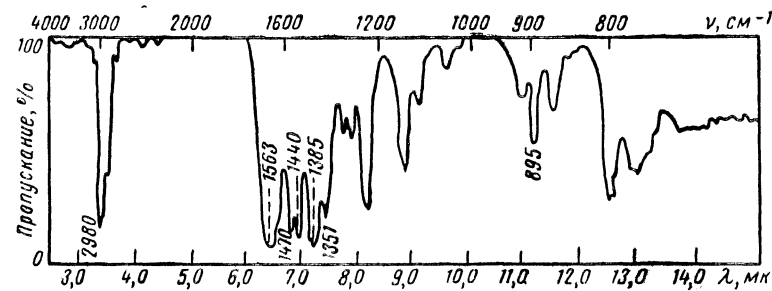


Рис. II.123

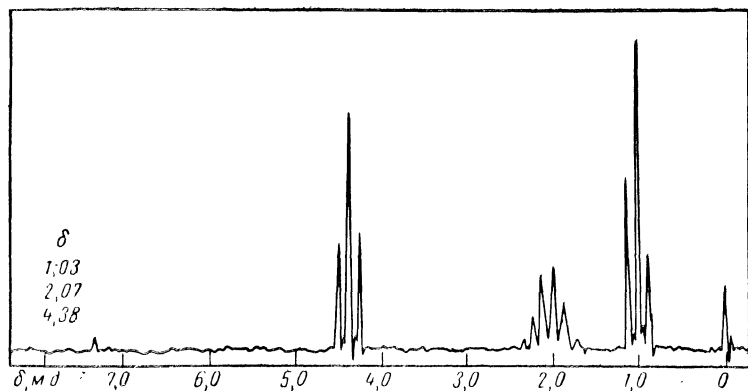


Рис. II.124

119. На рис. II.125, II.126 (жидкая пленка) и II.127 приведены УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения C_4H_7N . Определите его структуру.

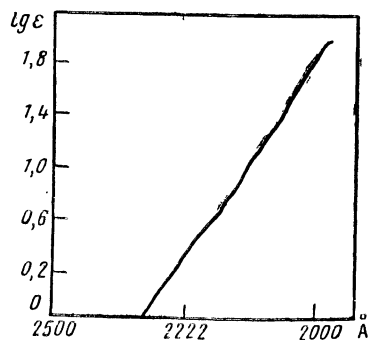


Рис. II.125

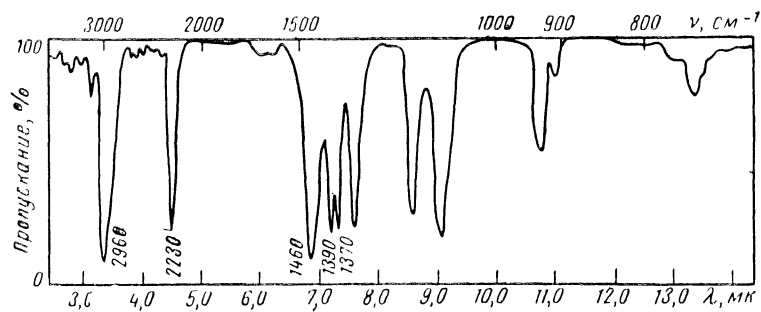


Рис. II.126

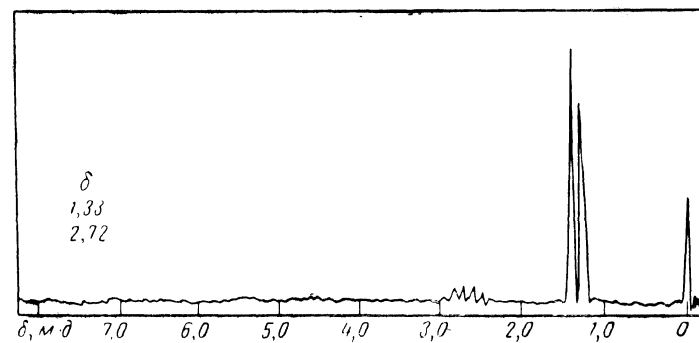


Рис. II.127

120. Соединение C_4H_7ON не имеет максимумов поглощения в УФ-области. Его ИК- и ПМР-спектры представлены на рис. II.128 (жидкая пленка) и II.129. Определите строение этого соединения.

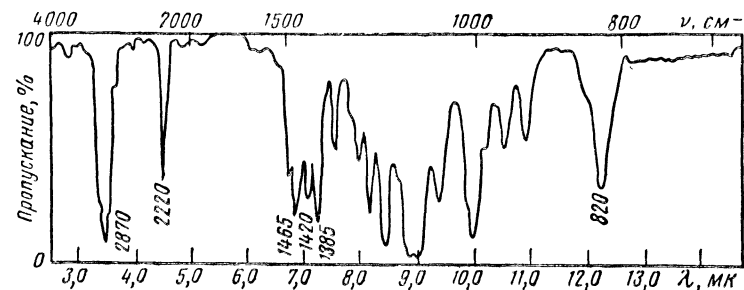


Рис. II.128

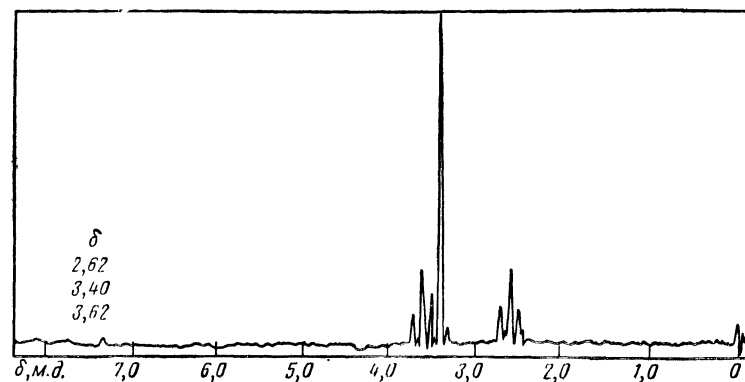


Рис. II.129

121. ИК- и ПМР-спектры соединения $C_3H_6O_2NCI$ приведены на рис. II.130 (жидкая пленка) и II.131. В УФ-области соединение имеет поглощение с $\lambda_{\text{макс}}=280 \text{ нм}$ ($\lg \epsilon=1,48$). Определите структурную формулу соединения.

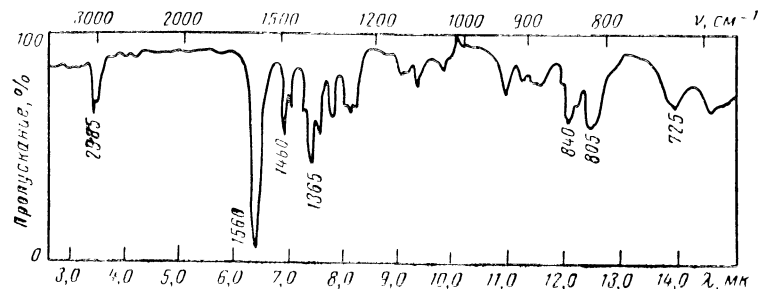


Рис. II.130

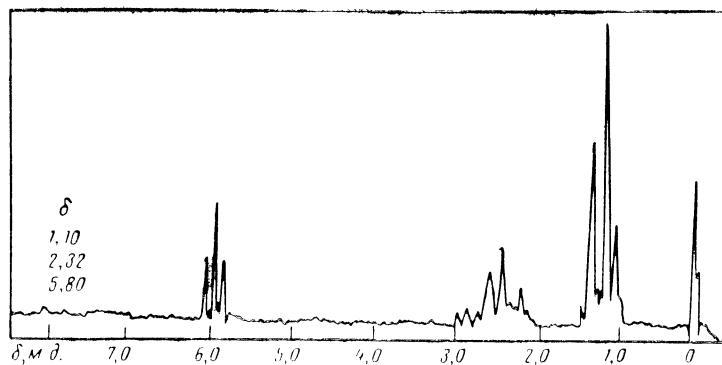


Рис. II.131

122. Определите структурную формулу соединения C_8H_6 , спектры которого приведены на рис. II.132 (в растворе циклогексана), II.133 (жидкая пленка) и II.134.

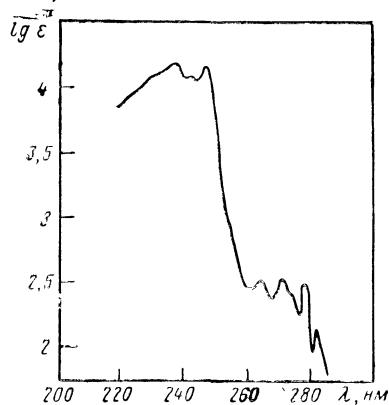


Рис. II.132

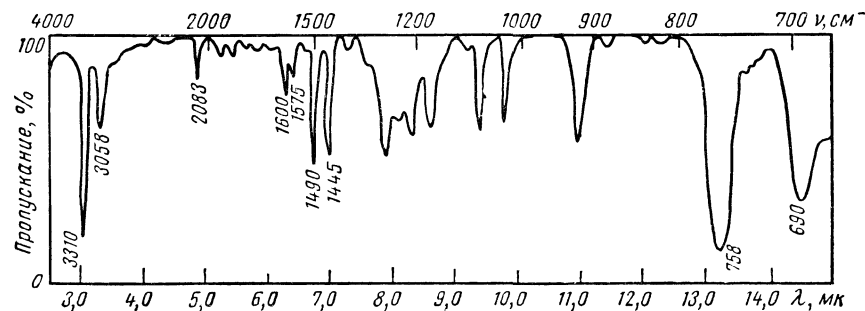


Рис. II.133

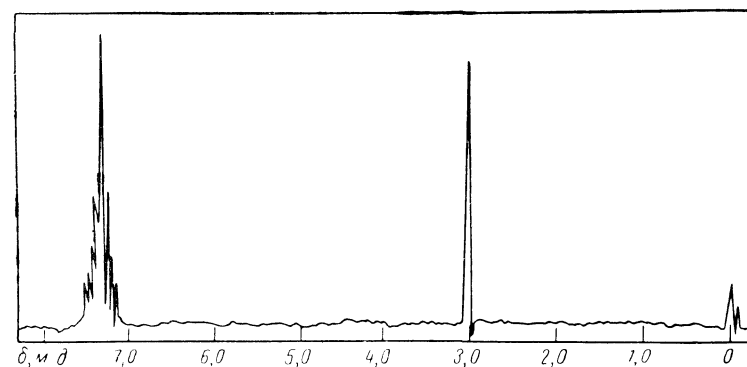


Рис. II.134

123. УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения C_8H_{10} представлены на рис. II.135 (в растворе циклогексана), II.136 (жидкая пленка) и II.137. Определите строение соединения.

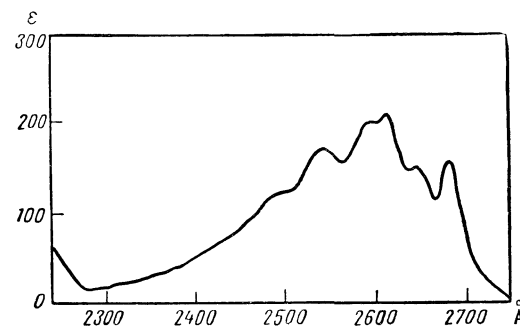


Рис. II.135

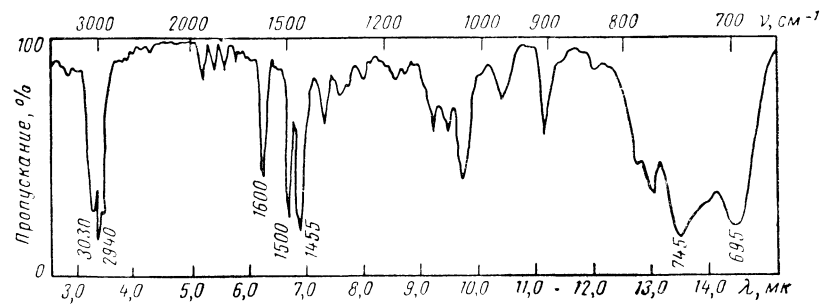


Рис. II.136

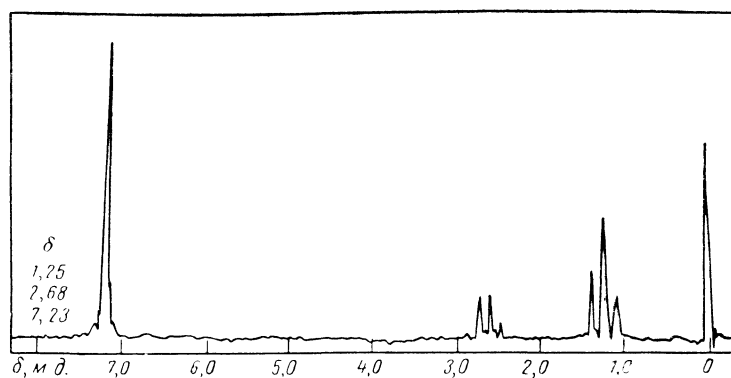


Рис. II.137

124. УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения C_8H_{10} приведены на рис. II.138 (в растворе изооктана), II.139 (жидкая пленка) и II.140. Определите строение соединения.

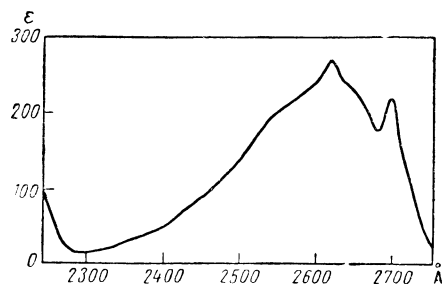


Рис. II.138

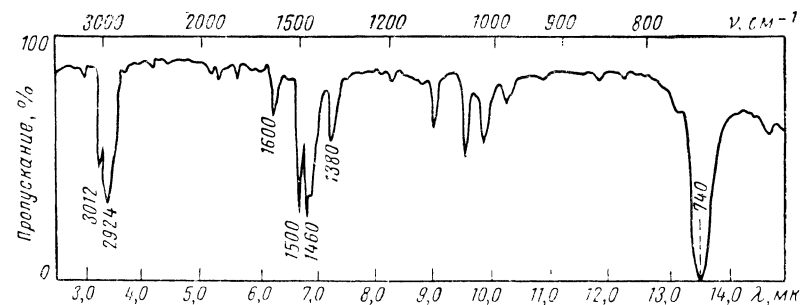


Рис. II.139

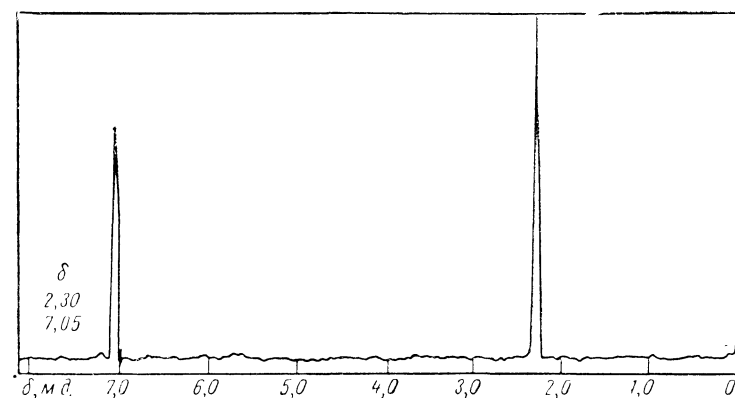


Рис. II.140

125. УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения C_8H_{10} приведены на рис. II.141 (в растворе циклогексана), II.142 (жидкая пленка) и II.143. Определите строение соединения.

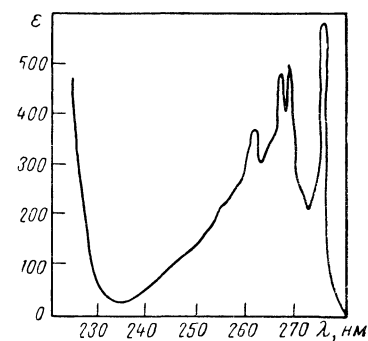


Рис. II.141

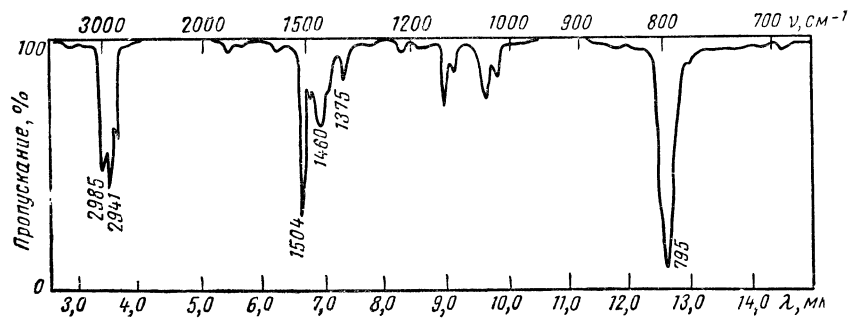


Рис. II.142

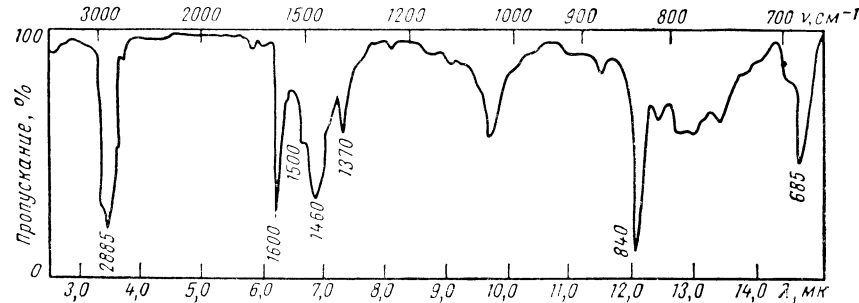


Рис. II.145

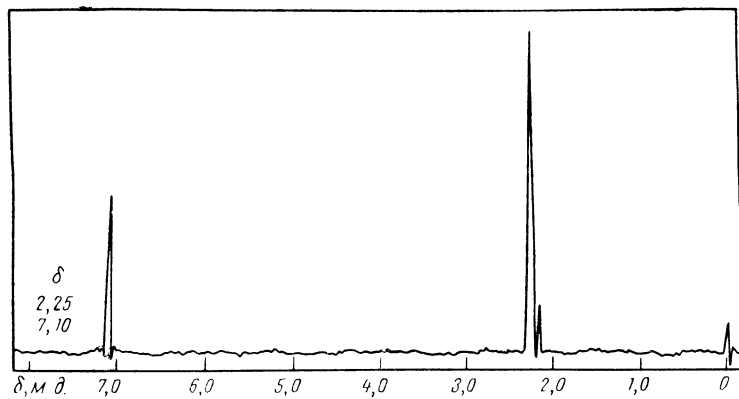


Рис. II.143

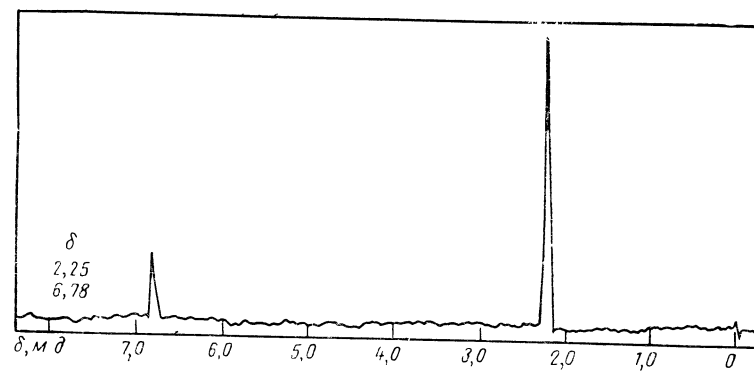


Рис. II.146

126. Соединение C_9H_{12} имеет УФ-, ИК- и ПМР-спектры, представленные на рис. II.144 (в растворе изеооктана), II.145 (жидкая пленка) и II.146. Определите строение этого соединения.

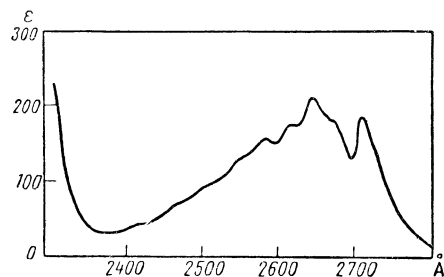


Рис. II.144

127. УФ-, ИК и ПМР-спектры соединения $C_{11}H_{16}$ представлены на рис. II.147 (в растворе циклогексана), II.148 (жидкая пленка) и II.149. Определите по ним строение соединения.

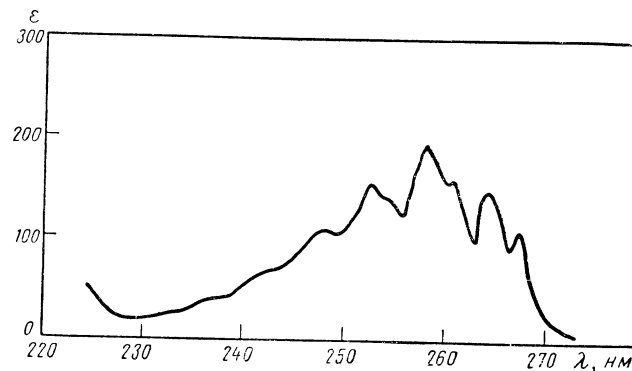


Рис. II.147

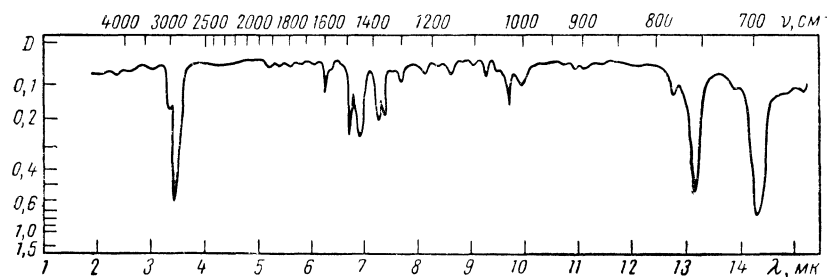


Рис. II.148

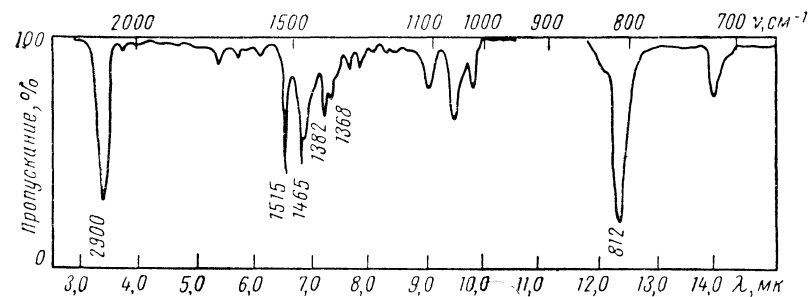


Рис. II.151

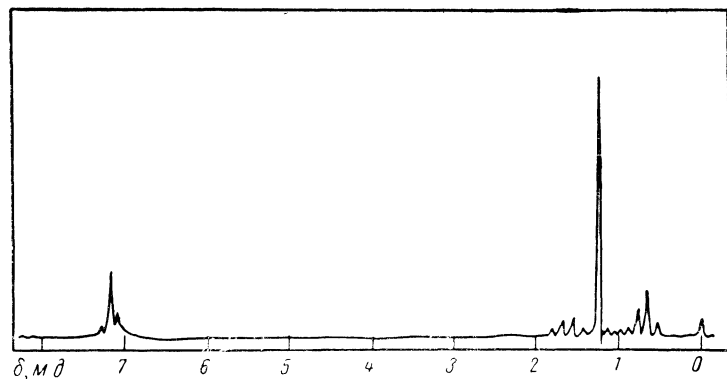


Рис. II.149

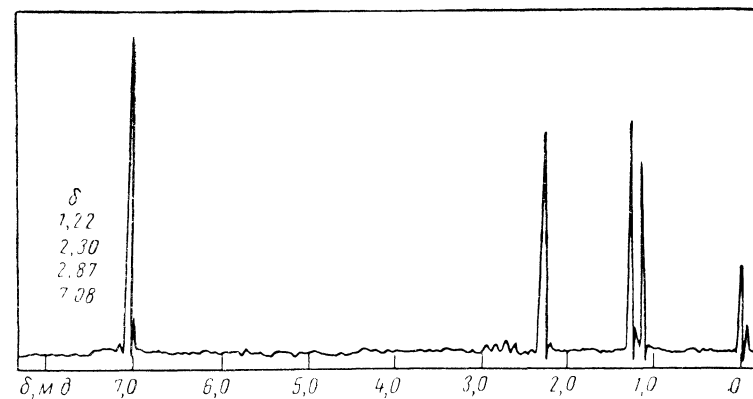


Рис. II.152

128. Определите структуру соединения по приведенным УФ-, ИК- и ПМР-спектрам (рис. II.150, в растворе изookтана, II.151, жидкая пленка, II.152) и брутто-формуле $C_{10}H_{14}$.

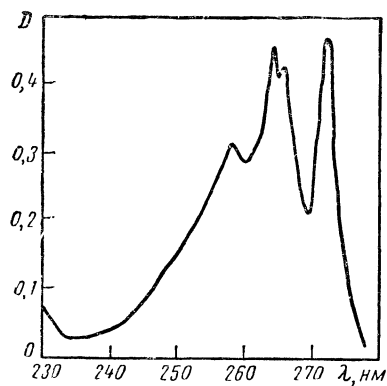


Рис. II.150

129. На рис. II.153, II.154 и II.155 приведены УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения C_7H_8S . Определите его структуру.

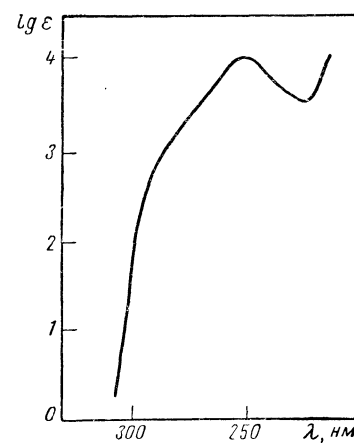


Рис. II.153

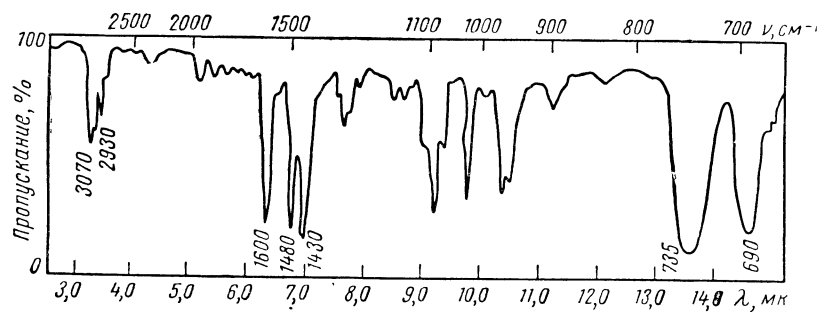


Рис. II.154

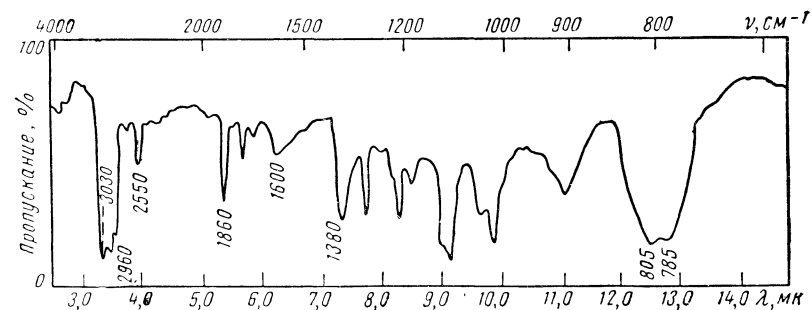


Рис. II.157

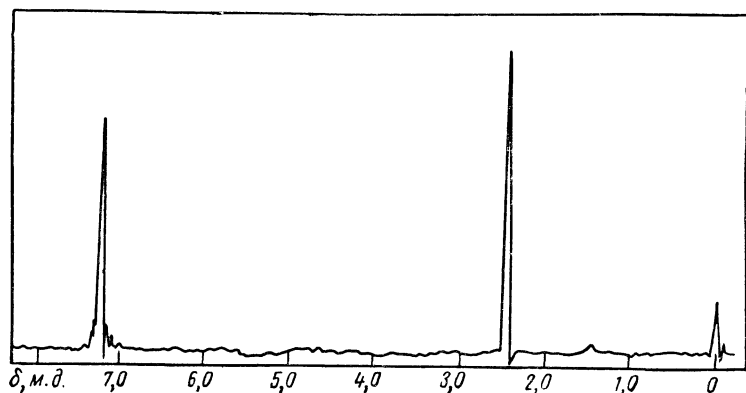


Рис. II.155

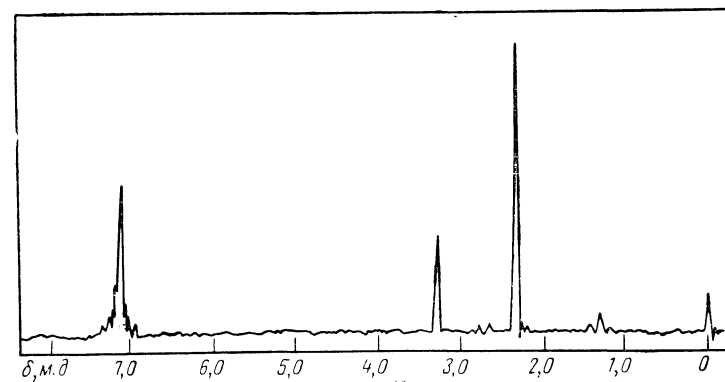


Рис. II.158

130. На рис. II.156, II.157 (пленка) и II.158 приведены УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения C_7H_8S . Определите его структуру.

131. УФ-, ИК и ПМР-спектры соединения C_7H_8O даны на рис. II.159, II.160 (жидкая пленка), II.161. Определите строение соединения.

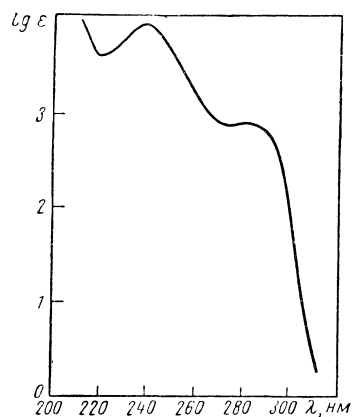


Рис. II.156

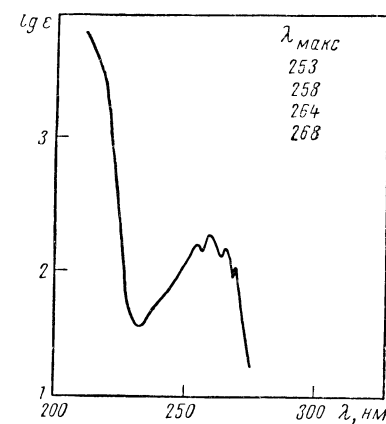


Рис. II.159

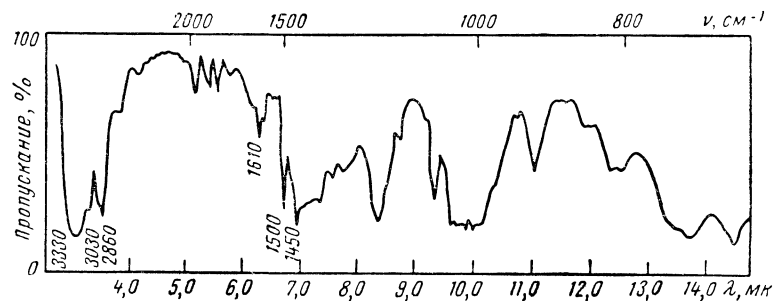


Рис. II.160

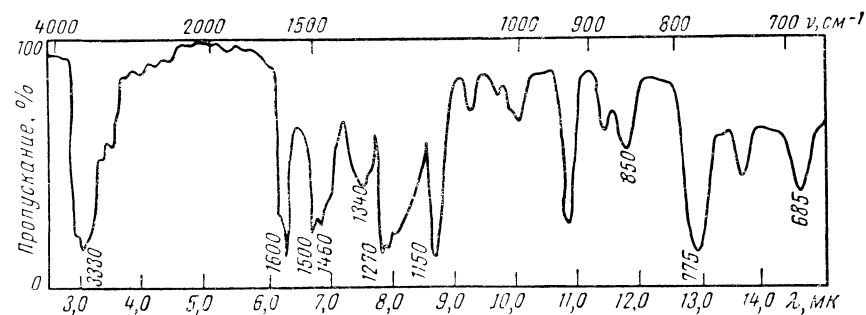


Рис. II.163

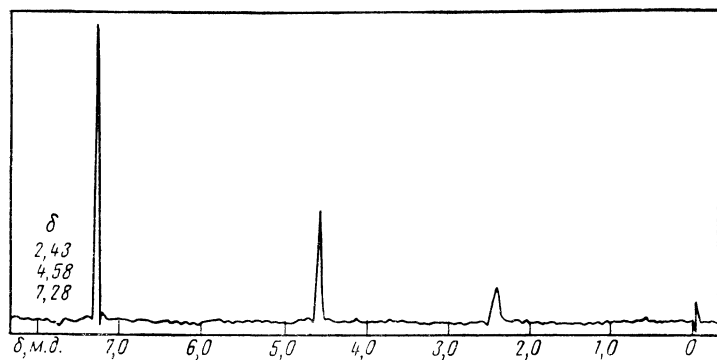


Рис. II.161

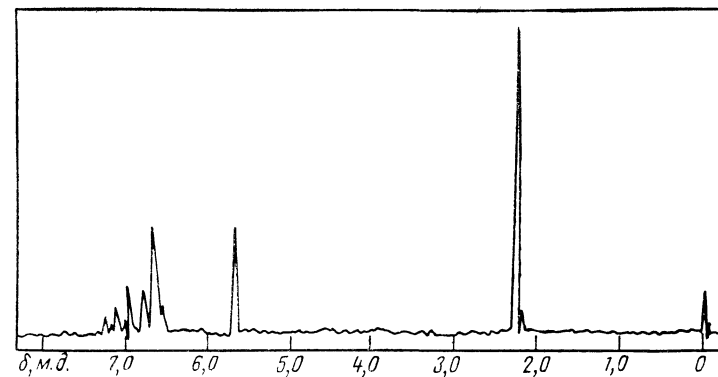


Рис. II.164

132. Соединение C_7H_8O имеет спектры, приведенные на рис. II.162, II.163 (жидкая пленка) и II.164. Определите его строение.

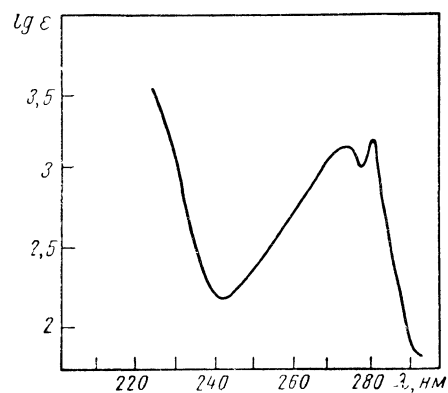


Рис. II.162

133. Установите строение соединения C_7H_8O по его УФ-, ИК- и ПМР-спектрам, которые приведены на рис. II.165, II.166 (жидкая пленка) и II.167.

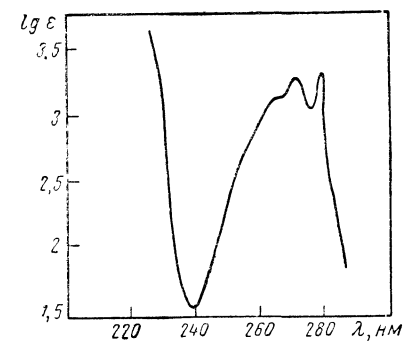


Рис. II.165

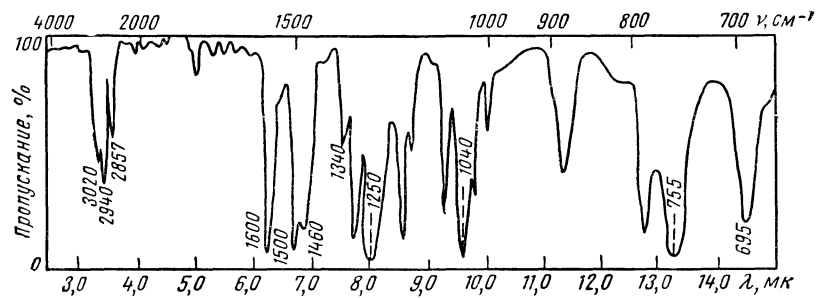


Рис. II.166

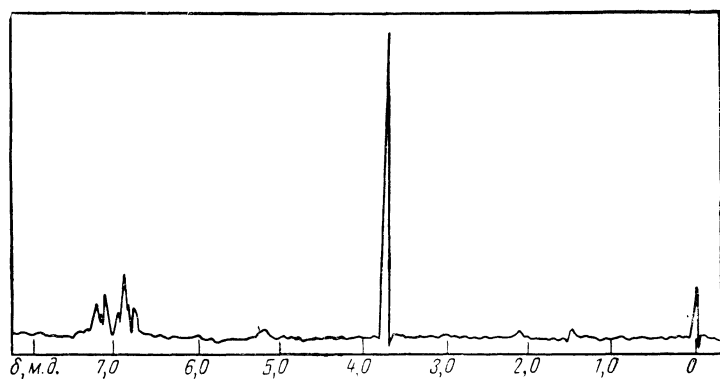


Рис. II.167

134. Определите структурную формулу соединения $\text{C}_7\text{H}_9\text{ON}$, спектры которого приведены на рис. II.168, II.169 и II.170.

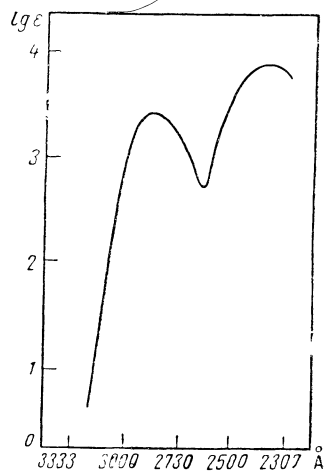


Рис. II.168

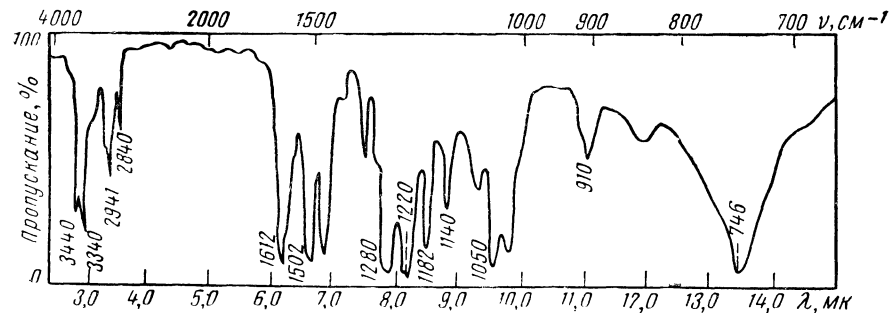


Рис. II.169

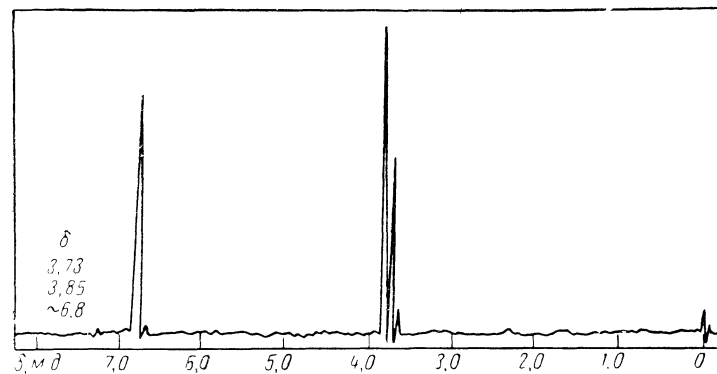


Рис. II.170

135. УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_2$ даны на рис. II.171, II.172 и II.173. Определите его структуру.

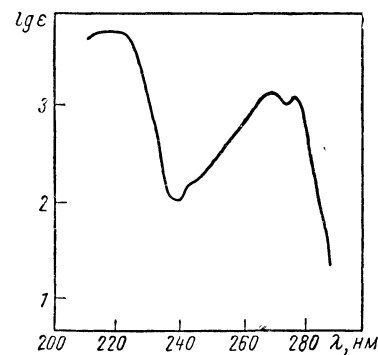


Рис. II.171

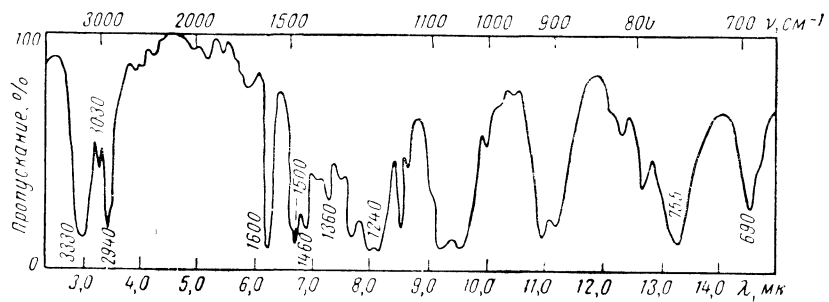


Рис. II.172

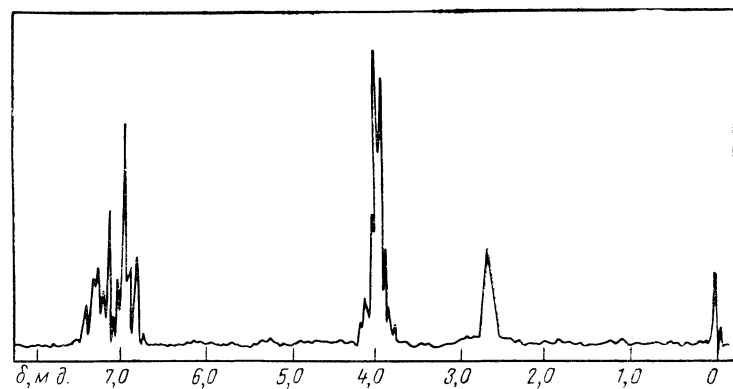


Рис. II.173

136. Установите строение соединения C_8H_9OCl по его УФ-, ИК- и ПМР-спектрам, которые приведены на рис. II.174, II.175 (жидкая пленка) и II.176.

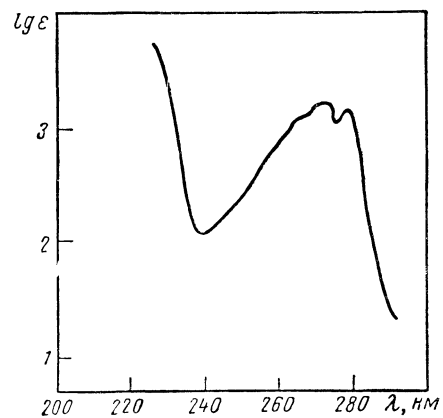


Рис. II.174

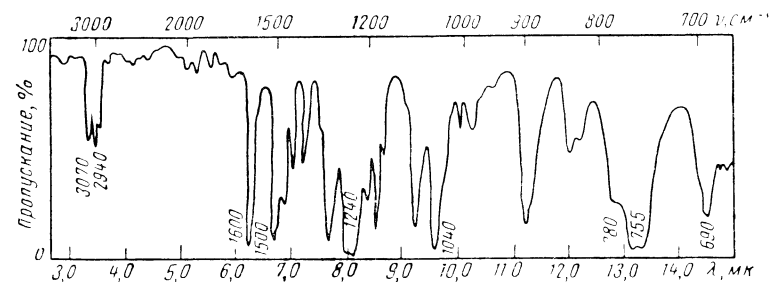


Рис. II.175

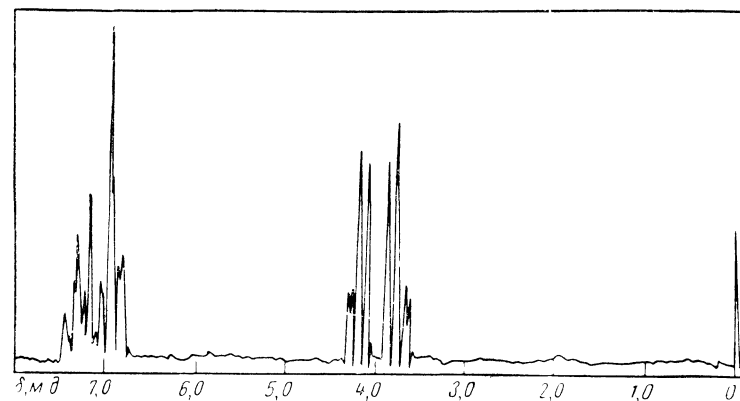


Рис. II.176

137. На рис. II.177, II.178 (жидкая пленка), II.179 приведены УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения C_7H_6O . Установите его строение.



Рис. II.177

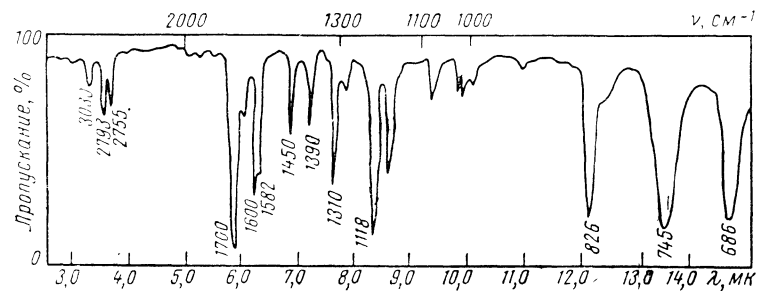


Рис. II.178

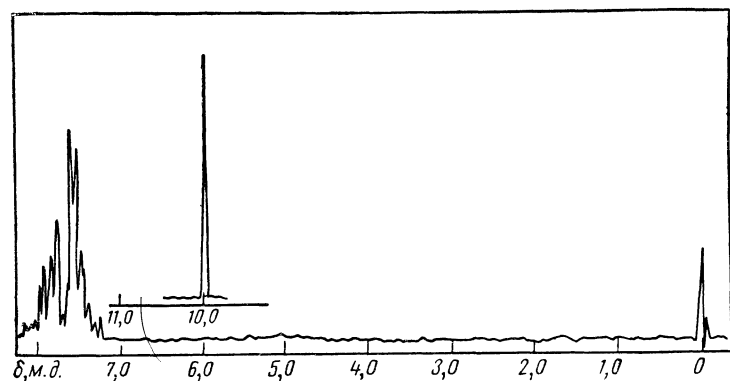


Рис. II.179

138. УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения $C_7H_5O_3N$ приведены на рис. II.180, II.181 и II.182. Определите его строение.

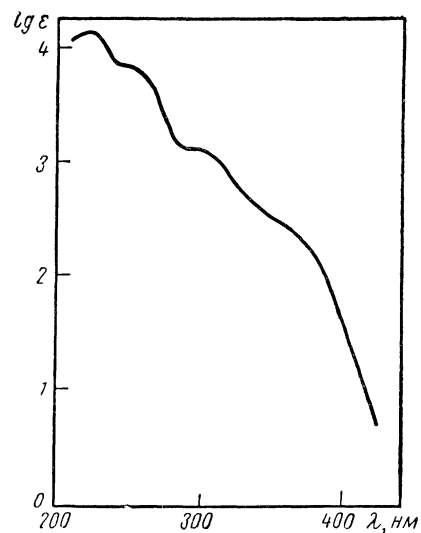


Рис. II.180

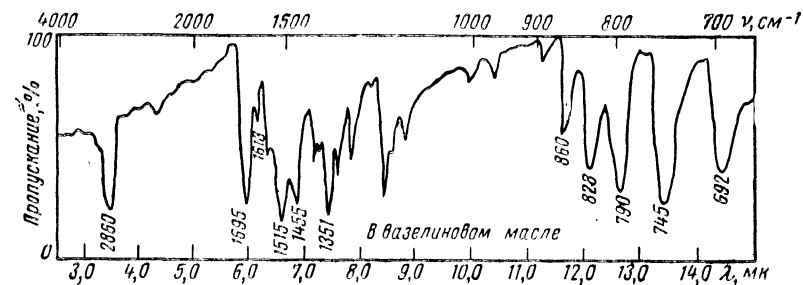


Рис. II.181

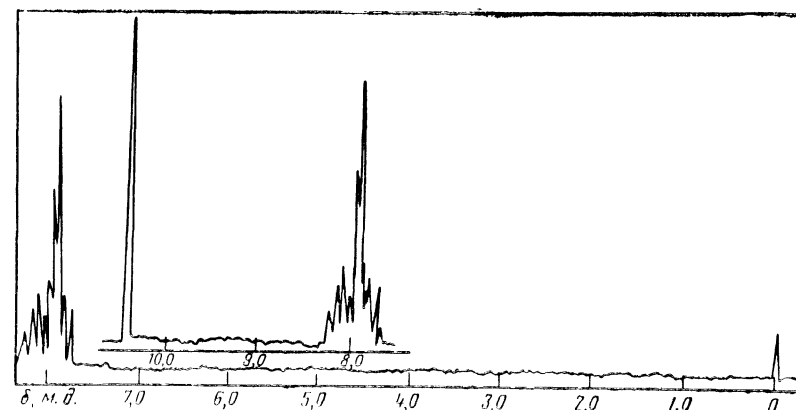


Рис. II.182

139. В УФ-спектре соединения C_7H_5OCl имеет три полосы поглощения (с $\lambda_{\text{макс}}=210$ нм и $\lg \epsilon=4,15$, $\lambda_{\text{макс}}=260$ нм и $\lg \epsilon=4,24$, $\lambda_{\text{плечо}}=292$ нм и $\lg \epsilon=3,28$). Его ИК- и ПМР-спектры представлены на рис. II.183 и II.184. Определите строение соединения.

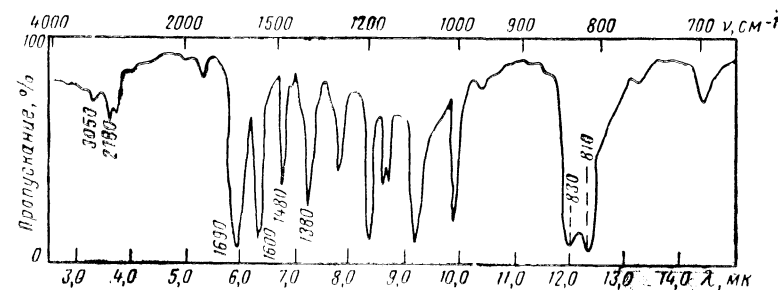


Рис. II.183

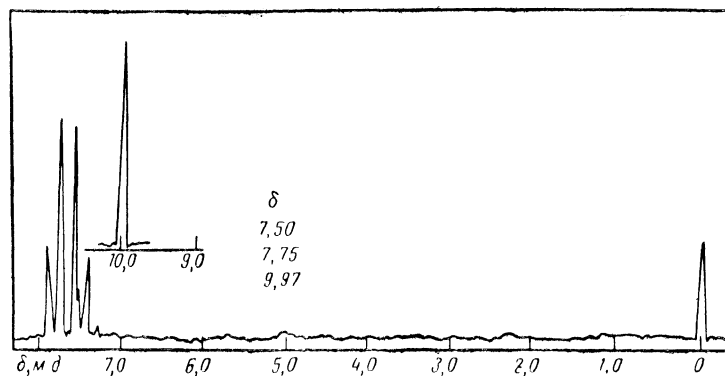


Рис. II.184

140. Установите строение соединения $C_8H_8O_2$ по его УФ-, ИК- и ПМР-спектрам, которые приведены на рис. II.185, II.186 (жидкая пленка) и II.187.



Рис. II.185

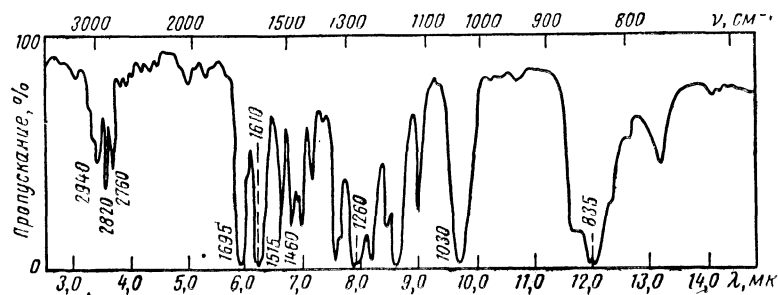


Рис. II.186

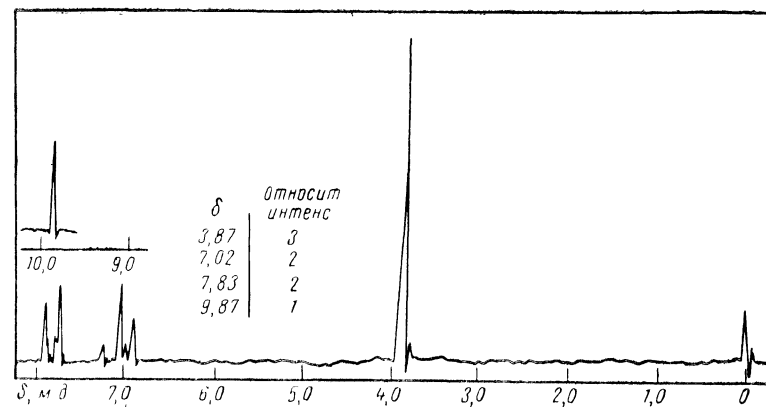


Рис. II.187

141. УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения $C_9H_{11}ON$ приведены на рис. II.188, II.189 (в пластинке КВГ) и II.190. Определите его строение.

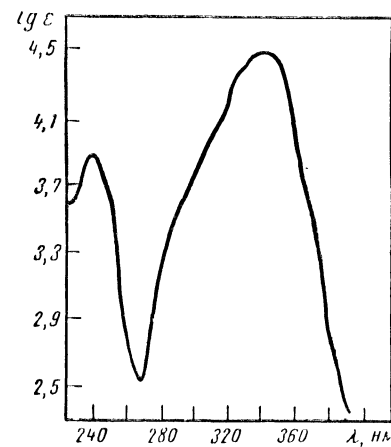


Рис. II.188

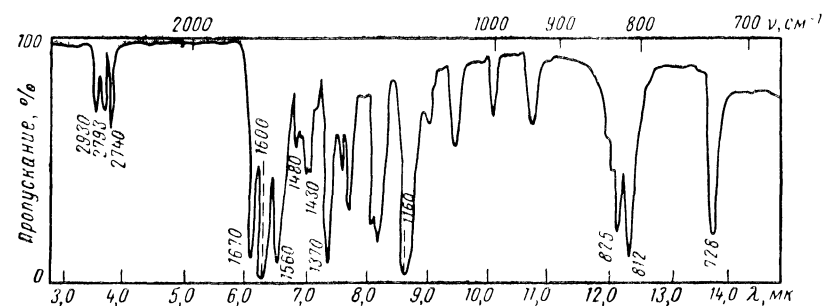


Рис. II.189

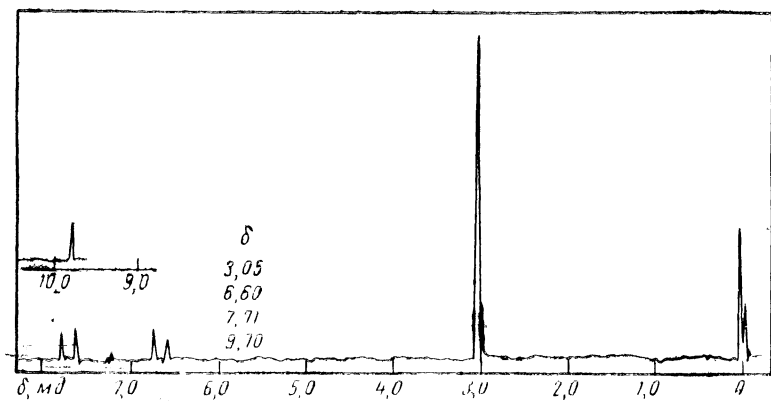


Рис. II.190

142. Установите строение соединения C_8H_8O по его УФ-, ИК- и ПМР-спектрам, которые приведены на рис. II.191, II.192 (жидкая пленка) и II.193.

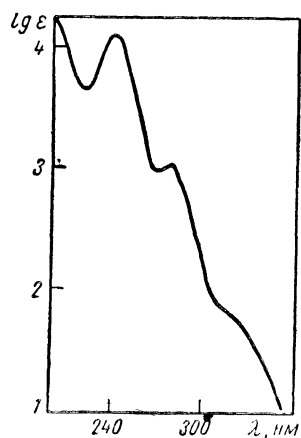


Рис. II.191

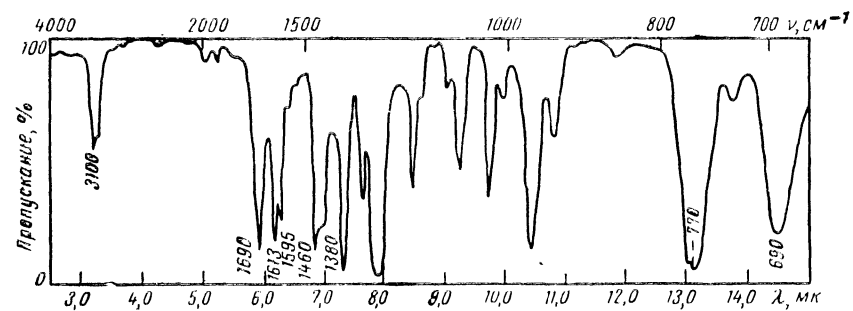


Рис. II.192

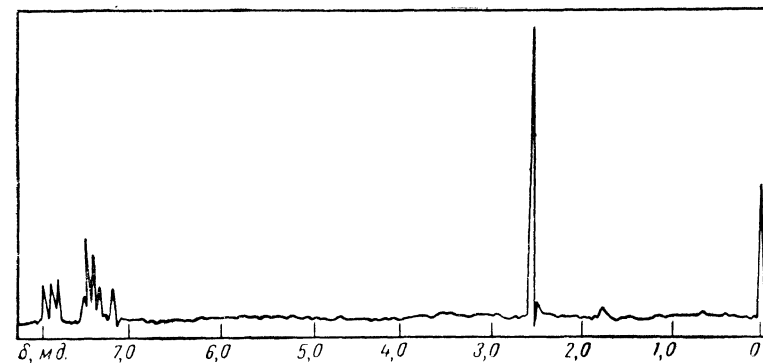


Рис. II.193

143. На рис. II.194, II.195 (жидкая пленка) и II.196 приведены УФ-, ИК- и ПМР-спектры соединения C_8H_7OSi . Определите его строение.

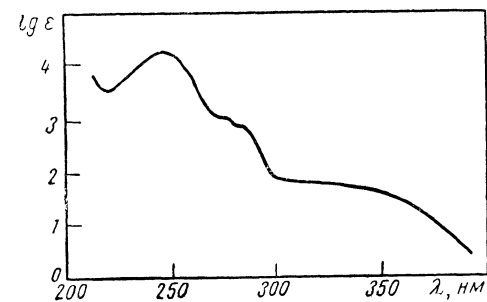


Рис. II.194

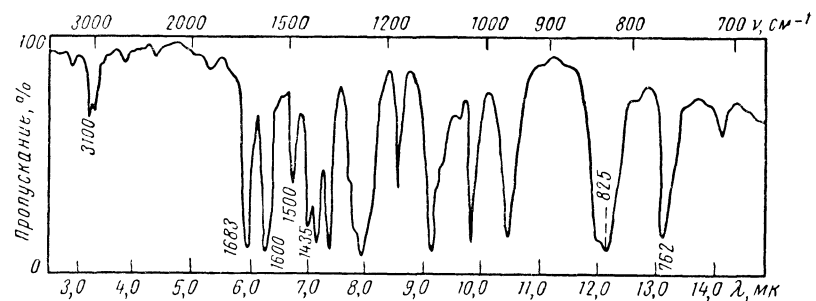


Рис. II.195

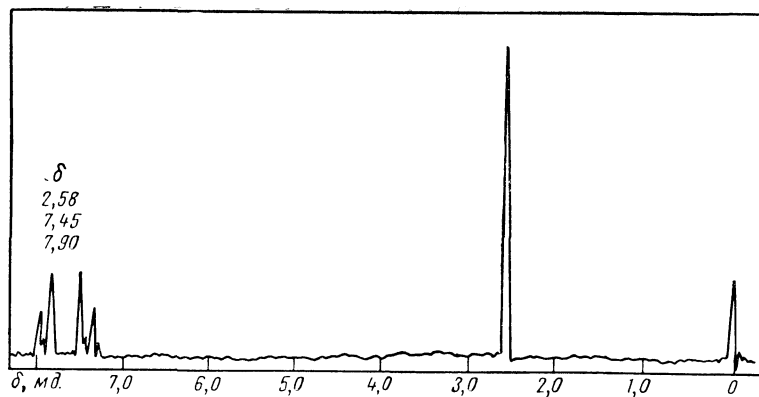


Рис. II.196

144. Установите структуру соединения $C_8H_8O_2$, если известны его УФ-, ИК- и ПМР-спектры (рис. II.197, II.198, жидкая пленка, и II.199).

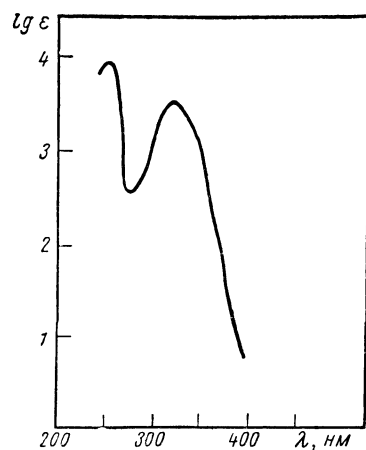


Рис. II.197

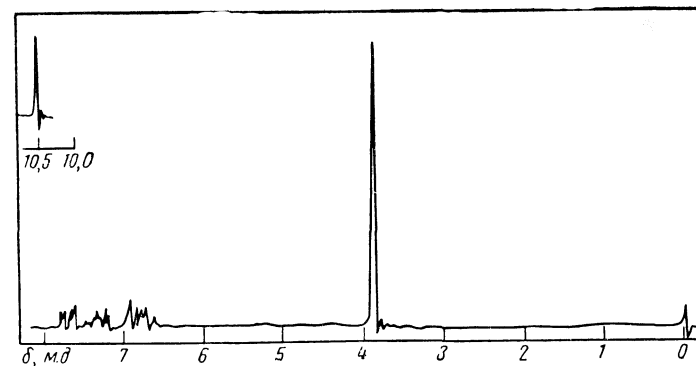


Рис. II.199

145. Определите строение соединения $C_{10}H_{12}O_2$, если оно имеет УФ-, ИК- и ПМР-спектры, приведенные на рис. II.200, II.201, II.202.

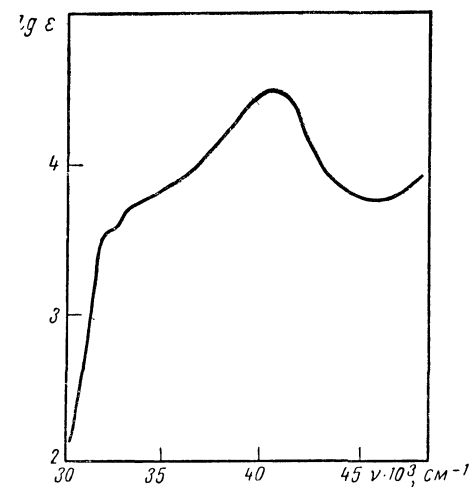


Рис. II.200

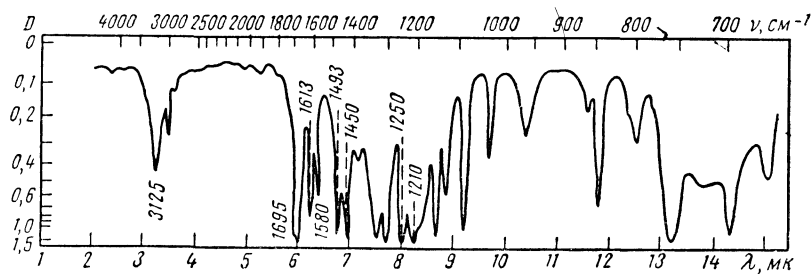


Рис. II.198

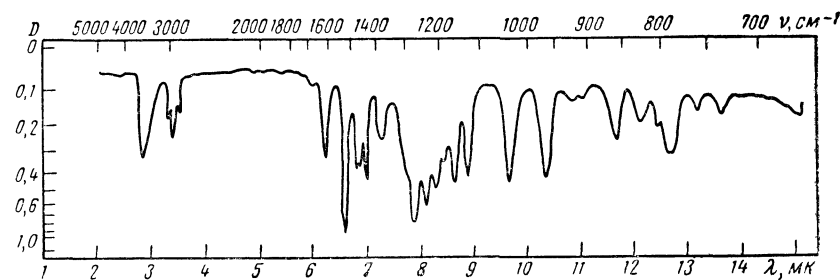


Рис. II.201

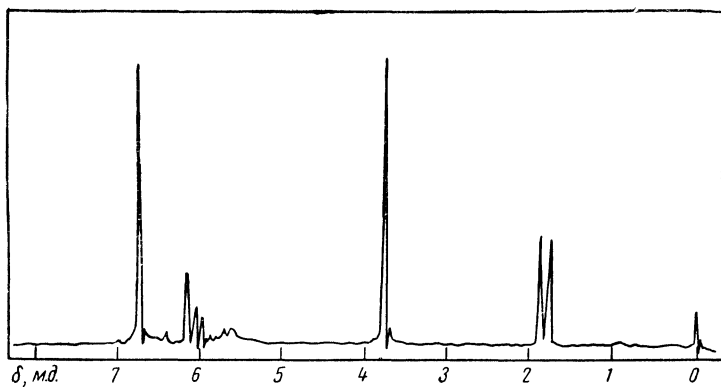


Рис. II.202

147. Определите строение соединения C_5H_8O , если известно, что оно прозрачно в ближнем ультрафиолете, а его ИК- и ПМР-спектры представлены на рис. II.205 и II.206.

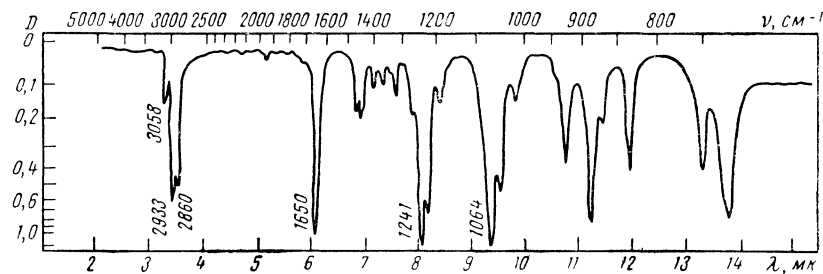


Рис. II.205

146. Определите строение соединения $C_6H_{14}O$, ИК- и ПМР-спектры которого приведены на рис. II.203, II.204, если известно, что оно не поглощает в УФ-области выше 200 нм.

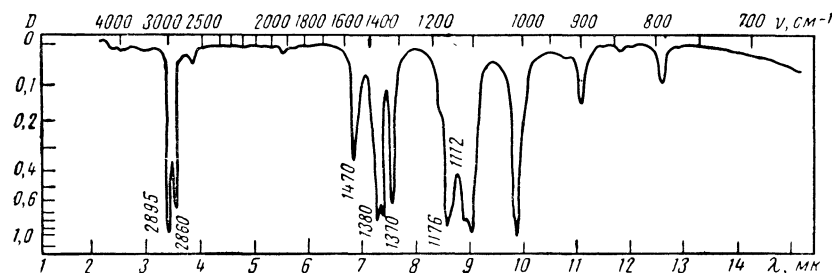


Рис. II.203

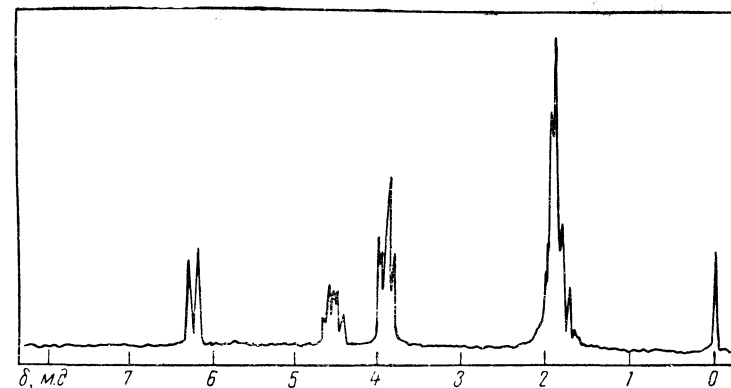


Рис. II.206

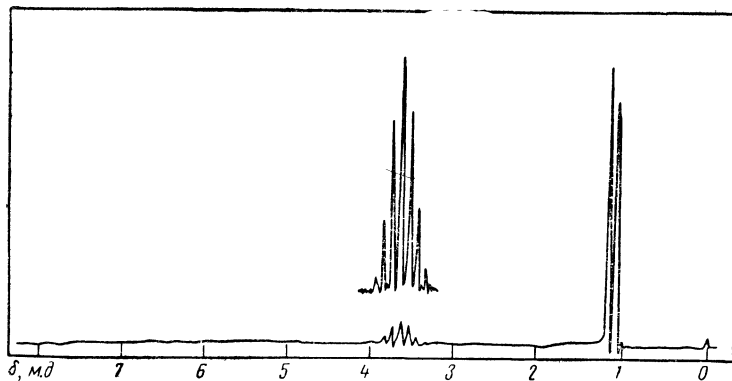


Рис. II.204

148. Соединение $C_6H_{13}O_2N$ прозрачно в УФ-области выше 210 нм. Его ИК- и ПМР-спектры приведены на рис. II.207 и II.208. Определите его строение.

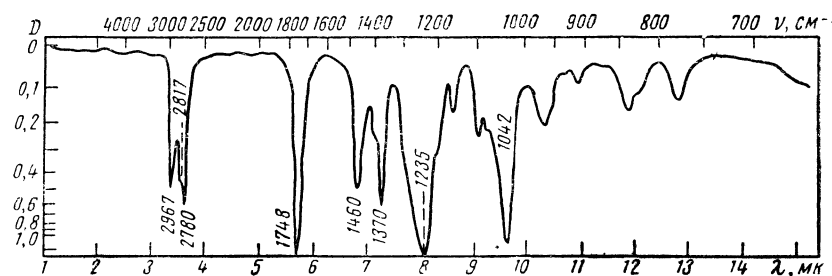


Рис. II.207

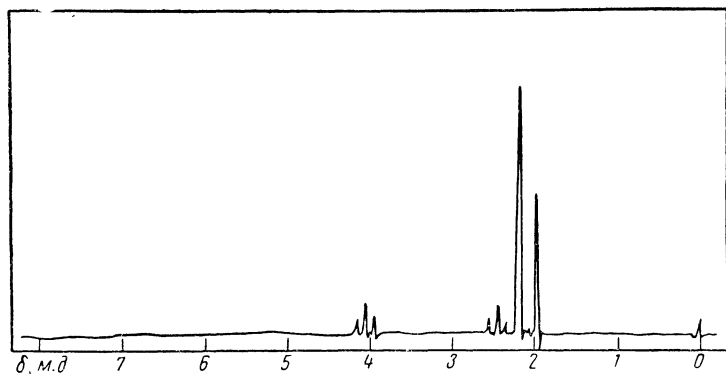


Рис. II.208

149. Соединение $C_6H_{12}O_2$ не поглощает в УФ-области выше 210 нм. Его ИК- и ПМР-спектры приведены на рис. II.209 и II.210. Определите структуру этого соединения.

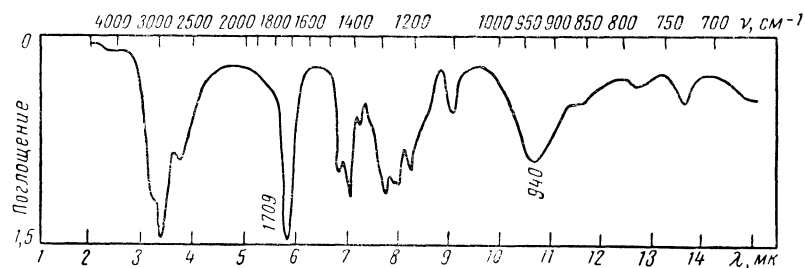


Рис. II.209

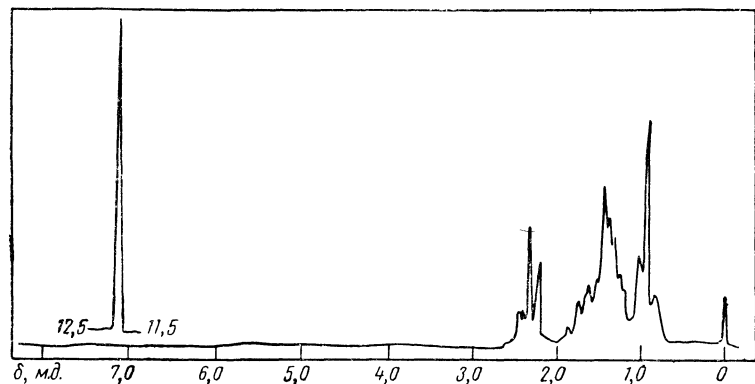


Рис. II.210

ОТВЕТЫ

1. α -Нафтолу (идентичные соединения имеют полностью совпадающие спектры).

2. 1-Бром-3-метилбутан.

3. 2,4-Динитрофенол.

4. Кислород может входить в следующие функциональные группы: OH, различные карбонилсодержащие группы C=O, группы SO, SO₂.

В спектре исследуемого соединения нет поглощения выше 2960 cm^{-1} (полосы ν_{CH}), т. е. группа OH отсутствует.

Карбонилсодержащие группы имеют интенсивные полосы поглощения ν_{CO} в интервале 1800—1600 cm^{-1} . Исследуемое соединение не имеет полос поглощения в этой области, следовательно, оно не содержит кислород в виде C=O.

Отсутствие полосы, характерной для сульфокисей (1070—1030 cm^{-1}), свидетельствует об отсутствии в соединении группы S=O.

Сульфоны характеризуются двумя интенсивными полосами при 1350—1300 и 1160—1120 cm^{-1} , которые могут быть расщеплены. Соответствующие полосы наблюдаются в спектре исследуемого соединения (1312, 1282 и 1130 cm^{-1}). Следовательно, соединение содержит серу и кислород в виде группы SO₂. Структура соединения $(n-C_3H_7)_2SO_2$.

5. В спектре наблюдаются две резкие полосы при 3485 и 3356 cm^{-1} . Такое поглощение характерно для первичных аминов. Полоса при 1616 cm^{-1} может быть отнесена к деформационным колебаниям группы NH₂. Неплоские деформационные колебания группы NH₂ дают широкую полосу средней интенсивности в области 900—650 cm^{-1} . Этим колебаниям соответствует в спектре полоса при 792 cm^{-1} . Следовательно, один из атомов азота входит в группу NH₂.

Второй атом азота либо может входить в кислородсодержащую группу (NO₂, NO), либо атомы азота и кислорода находятся в различных группах.

По соотношению количества атомов углерода и водорода видно, что исследуемое соединение является ненасыщенным. Непредельные и ароматические нитросоединения имеют полосы антисимметричных и симметричных валентных колебаний нитрогруппы при 1550—1510 и 1365—1335 cm^{-1} . В спектре исследуемого соединения есть полосы при 1510 и 1335 cm^{-1} . Следовательно, в веществе присутствует нитрогруппа.

Положение заместителей по ИК-спектру однозначно не доказывается, хотя отсутствие поглощения в области 860—800 cm^{-1} может свидетельствовать о том, что соединение не является 1,2,3,4-тетразамещенным. Поглощение при 890 cm^{-1} может быть в одинаковой степени отнесено к неплоским деформационным колебаниям C—H ароматического цикла в 1,2,3,5- и 1,2,4,5-тетразамещенных.

Структура соединения 4-нитро-2,6-дихлоранилин.

6. $(CH_3)_2CHNO_2$

1560 cm^{-1} — $\nu_{as} NO_2$

1390 cm^{-1} — $\nu_s NO_2$

848 cm^{-1} — колебания с участием связи C—N



Другие колебания:
 2960 см^{-1} — ν_{CH}
 1470 см^{-1} — $\delta_{\text{as}} \text{CH}_3$
 1355 см^{-1} — $\delta_{\text{s}} \text{CH}_3$
 3226 см^{-1} — ν_{NH}
 1660 см^{-1} — полоса амид I
 1545 см^{-1} — полоса амид II
 720 см^{-1} — полоса вторичных амидов

Другие колебания:
 3050 см^{-1} — $\nu=\text{CH}_2$
 2941 см^{-1} — ν_{CH}
 1618 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{C}}$
 1447, 1380 см^{-1} — δ_{CH_3}
 990 см^{-1} — $\delta_{=\text{CH}_2}$

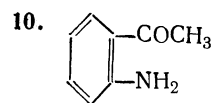


1736 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{O}}$
 1235 см^{-1} — колебания, включающие связь $\text{C}-\text{O}$

Другие колебания:
 2940 см^{-1} — $\nu_{\text{C}-\text{H}}$
 1460, 1380 см^{-1} — δ_{CH_3}

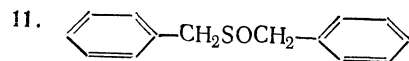


3330 см^{-1} — ν_{NH}
 2212 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$
 1504 см^{-1} — δ_{NH}
 1136 см^{-1} — колебания с участием связи $\text{C}-\text{N}$

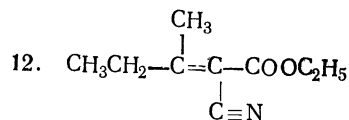


3450, 3340 см^{-1} — ν_{NH_2}
 1680 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{O}}$
 1630 см^{-1} — δ_{NH_2}
 Другие колебания:
 1600, 1500 см^{-1} — колебания ароматического кольца
 1460 и 1355 см^{-1} — δ_{CH_3}

Тип замещения в бензольном кольце не может быть определен однозначно, так как в эту же область попадают неплоские деформационные колебания аминогруппы.



1030 см^{-1} — $\nu_{\text{S}=\text{O}}$
 Другие колебания:
 3010 см^{-1} — $\nu_{\text{CHаром}}$
 1605, 1500 см^{-1} — колебания ароматического кольца
 775, 702 см^{-1} — неплоские деформационные колебания ароматического кольца, характерные для монозамещенного бензола

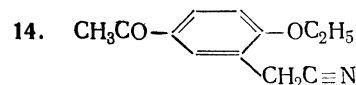


2220 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$
 1725 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{O}}$
 1210 см^{-1} — колебания с участием связи $\text{C}-\text{O}$
 Другие колебания:
 2941 см^{-1} — ν_{CH}



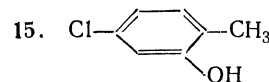
1600 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{C}}$
 1471, 1380 см^{-1} — δ_{CH_3}

2250 см^{-1} — ν_{SH}
 Другие колебания:
 2925 см^{-1} — ν_{CH_2}
 1438 см^{-1} — δ_{CH_2}



2222 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$
 1670 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{O}}$
 1260 см^{-1} — колебания с участием связи $\text{C}-\text{O}$

Другие колебания:
 2940 см^{-1} — ν_{CH}
 1585, 1500 см^{-1} — колебания ароматического кольца
 1420, 1350 см^{-1} — $\delta_{\text{CH}} \text{ алиф}$
 868, 808 см^{-1} — неплоские деформационные колебания CH бензольного кольца, характерные для 1,2,4-замещения



3360 см^{-1} — ν_{OH}
 1400, 1200 см^{-1} — колебания с участием связи $\text{C}-\text{O}$ фенола

Другие колебания:
 1600, 1498 см^{-1} — колебания ароматического кольца
 870, 808 см^{-1} — неплоские деформационные колебания CH бензольного кольца
 760 см^{-1} — $\nu_{\text{C}-\text{Cl}}$



3330 см^{-1} — ν_{OH}
 17. В спектре имеются две резкие полосы поглощения при 3509 и 3344 см^{-1} , которые по положению и форме соответствуют поглощению первичной аминогруппы. Присутствует также полоса 1640 см^{-1} , которая может быть отнесена к деформационным колебаниям аминогруппы. С наличием аминогруппы связана также одна из полос в области 900—650 см^{-1} . Следовательно, соединение содержит аминогруппу.

Из брутто-формулы видно, что соединение является сильно ненасыщенным. Поэтому можно предположить, что вещество содержит ароматические кольца. Для бензольного кольца характерны полосы поглощения при 1600, 1500 см^{-1} и полосы неплоских деформационных колебаний CH в области 900—700 см^{-1} , число и положение которых зависит от типа замещения. В исследуемом спектре имеются полосы при 1600, 1504 см^{-1} и несколько полос в низкочастотной области, часть из которых может принадлежать деформационным колебаниям CH кольца. Таким образом, видно, что вещество содержит бензольное кольцо.

Кислород не входит ни в группу OH , ни в группу $\text{C}=\text{O}$, так как соответствующих полос поглощения в спектре нет. Исходя из брутто-формулы, можно предположить, что в соединении может присутствовать одна из групп SO или SO_2 .

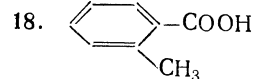
Группа SO в сульфоокисях характеризуется интенсивным поглощением в области 1070—1030 см^{-1} , в эфирах сульфоновых кислот RSOOR' полосой при 1140—1125 см^{-1} .

Для группы SO_2 сульфонов характерны две интенсивные полосы при 1350—1300 и 1160—1120 см^{-1} , в сульфохлоридах и сульфамидах соответствующие полосы расположены при 1375—1300 и 1190—1120 см^{-1} . В рассматриваемом спектре нет интенсивных полос в области поглощения группы SO , из чего следует, что эта группа отсутствует.

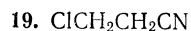
Имеющиеся в спектре сильные полосы 1299 и 1150 см^{-1} можно отнести к колебаниям группы SO_2 , хотя на основании ИК-спектра нельзя сказать, является ли исследуемое соединение сульфеном, сульфохлоридом или сульфамидом.

Таким образом, по ИК-спектру и брутто-формуле можно определить, что вещество содержит NH_2 , SO_2 и бензольное кольцо.

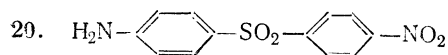
Структура соединения: $\text{Cl}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{SO}_2-\text{C}_6\text{H}_4-\text{NH}_2$



3125—2600 см^{-1} — ν_{OH}
1680 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
1600, 1500 см^{-1} —колебания ароматического кольца
1307, 1263 см^{-1} —колебания, связанные с наличием связи C—O
920 см^{-1} —деформационные колебания OH
735 см^{-1} —неплоские деформационные колебания CH ароматического кольца, характерные для орто-замещения

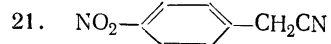


2941 см^{-1} — ν_{CH_2}
2198 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$
1439 см^{-1} — δ_{CH_2}
752 см^{-1} — $\nu_{\text{C—Cl}}$



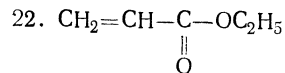
3448, 3344 см^{-1} — ν_{NH_2}
1630 см^{-1} — δ_{NH_2}
1600, 1500 см^{-1} —колебания бензольного кольца
1522 см^{-1} — $\nu_{\text{S—O}}$
1350 см^{-1} — $\nu_{\text{S—O}}$
1300 см^{-1} — $\nu_{\text{S—O}}$
1148 см^{-1} — $\nu_{\text{S—O}}$

Полосы в низкочастотной области принадлежат деформационным колебаниям CH кольца, колебаниям нитрогруппы и аминогруппы.

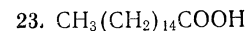


3050 см^{-1} — $\nu_{\text{CH}} \text{ аром}$
2220 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$
1600, 1500 см^{-1} —колебания бензольного кольца
1510 см^{-1} — $\nu_{\text{as NO}_2}$
1335 см^{-1} — $\nu_{\text{s NO}_2}$
858 или 830 см^{-1} —колебания с участием связи C—N
730 см^{-1} —полоса нитросоединений
858 или 830 см^{-1} —неплоские деформационные колебания CH кольца.

Тип замещения определить трудно, так как ароматические нитросоединения имеют полосы поглощения в области 900—700 см^{-1} .



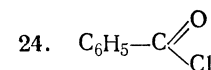
1725 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
1639 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
1298, 1250, 1190 см^{-1} —колебания с участием связи C—O
990 см^{-1} —деформационные колебания $\text{CH}_2=\text{CH}$



3000—2500 см^{-1} — ν_{OH}
1700 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
1466 см^{-1} — δ_{CH}
1300 см^{-1} —сложные колебания, с участием группы COOH
940 см^{-1} —деформационные колебания OH
722 см^{-1} —колебания $-(\text{CH}_2)_{14}-$

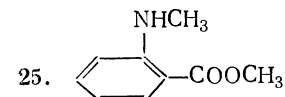
Группа малоинтенсивных полос в области 1350—1180 см^{-1} характерна для спектров твердых соединений с длинными алкильными цепочками. Число полос связано с длиной цепи следующими соотношениями: число групп CH_2 равно числу полос, умноженному на 2 при четном числе групп CH_2 . При нечетном числе метиленовых групп количество их равно числу полос, умноженному на 2, минус 1.

В спектре исследуемого соединения наблюдается семь полос в этой области. Две из них проявляются в виде плеч на интенсивной полосе поглощения группы COOH 1300 см^{-1} . Чтобы избежать этого перекрытия, целесообразно снимать спектры бариевых солей кислот. В растворах такая картина спектра не сохраняется, так как эти полосы вызваны веерными колебаниями метиленовых групп в *транс*-конформации, которая стабильна только в кристаллическом состоянии.

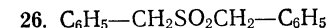


3050 см^{-1} — $\nu_{\text{CH}} \text{ аром}$
1780 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$ хлорангидрида
1600, 1585, 1449 см^{-1} —колебания ароматического кольца

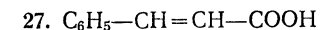
Определить характер замещения по спектру трудно, так как в этой же области дает полосу колебание C—Cl .



3340 см^{-1} — ν_{NH}
2940 см^{-1} — ν_{CH_3}
1695 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
1610, 1580, 1515 см^{-1} —колебания ароматического кольца
1235 см^{-1} —колебания с участием связи C—O

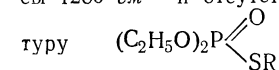


3030 см^{-1} — ν_{CH}
1610, 1495 см^{-1} —колебания ароматического кольца
1300, 1125, 1111 см^{-1} — ν_{SO_2}



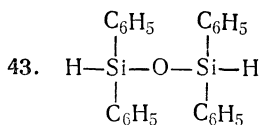
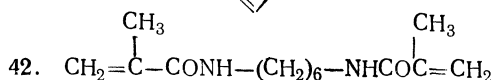
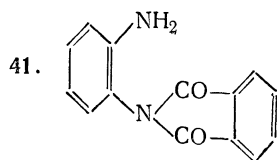
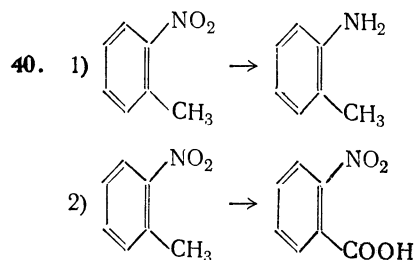
3000—2500 см^{-1} — ν_{OH}
1680 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
1620 см^{-1} — $\nu_{\text{C=C}}$
1580, 1500, 1450 см^{-1} —колебания ароматического кольца
980 см^{-1} —деформационные колебания *транс*- $\text{HC}=\text{CH}$
935 см^{-1} —деформационные колебания OH
765, 708 см^{-1} —неплоские деформационные колебания CH бензольного кольца

28. При выборе одной из двух структур основываются на тех структурных элементах соединений, которые дают в спектре характеристические полосы. В рассматриваемых соединениях характеристическими поглощениями обладают группы P=S (800—650 см^{-1}) и P=O (1300—1250 см^{-1}). Наличие в спектре полосы 1280 см^{-1} и отсутствие поглощения при 800—600 см^{-1} подтверждает структуру

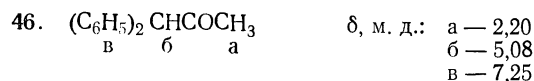
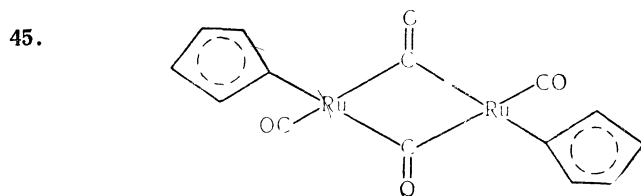


29. Группами, имеющими характеристическое поглощение, в открытой структуре будут С=О и СООН, в циклической — С=С и С=О лактонная. Присутствие в спектре полос 3260 см^{-1} ($\nu_{\text{ОН}}$), 1720 см^{-1} ($\nu_{\text{С=О}}$ кетона) и 900 см^{-1} ($\delta_{\text{ОН}}$ кислоты) подтверждает открытую форму леулиновой кислоты $\text{CH}_3\text{C}(\text{OH})(\text{COOH})\text{CH}_2\text{COOH}$. Частоты 2970, 2930, 2870 и 2850 см^{-1} принадлежат валентным колебаниям метильной и метиленовой групп.

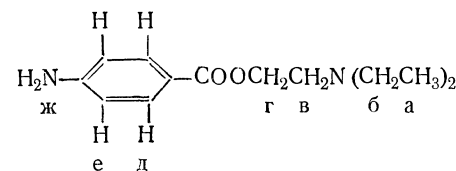
30. $\text{C}_2\text{H}_5\text{COOH}$ 35. CH_3CONH_2
 31. $(\text{CH}_3)_2\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{—O—N=O}$ 36. $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{COCH}_3$
 32. $(\text{CH}_3)_2\text{SO}_2$ 37. $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
 33. $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{NO}_2$ 38. $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{OH}$
 34. $(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3\text{SnC}\equiv\text{C—CH=CH}_2$ 39. $\text{CH}_3\text{COCH}_2\text{CH}_2\text{CH=CH}_2$



44. I—Заместители в одном кольце; II—заместители в разных кольцах.



47. В соединении имеется семь групп неэквивалентных протонов

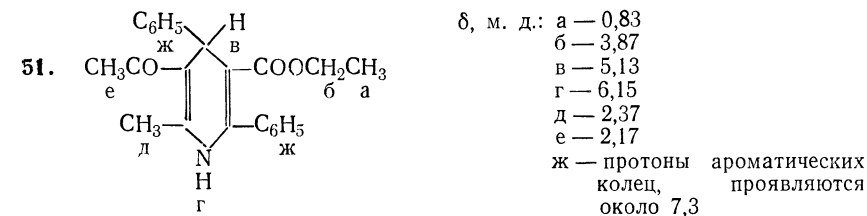
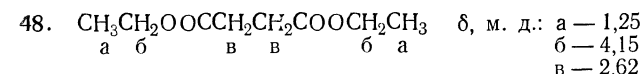


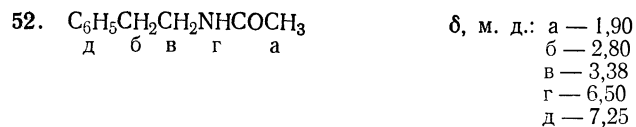
Найденные в таблице химические сдвиги этих протонов следующие:

δ , м. д.:	а — 0,9—1,1	д — 7,5
	б — 2,3—3,2	е — 6,5
	в — 2,3—3,2	ж — положение сигнала аминогруппы
	г — 3,9—4,3	зависит от условий измерения

В реальном спектре сигналы расположены следующим образом:

δ , м. д.:	а — 1,05	триплет за счет взаимодействия с CH_2 -группой.
	б — 2,62	должен быть квадруплет за счет расщепления на метильной группе; на него накладывается триплет протонов «в» ($\delta=2,82$ м. д.), вследствие чего картина сигнала сложная
	г — 4,33	триплет, искаженный за счет наложения сигнала протонов аминогруппы ($\delta=4,13$ м. д.)
	д — 7,83	группа ароматических протонов пара-замещенного бензольного кольца
	е — 6,63	





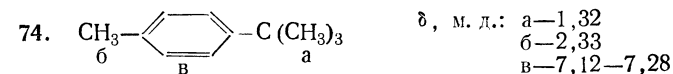
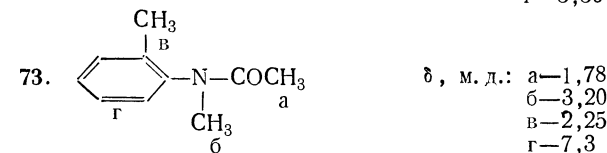
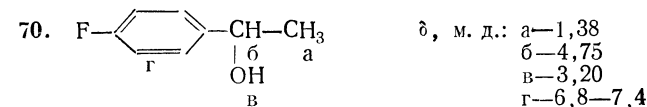
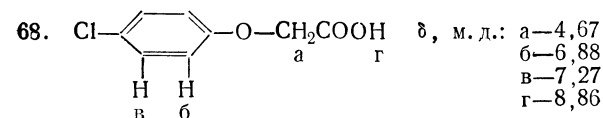
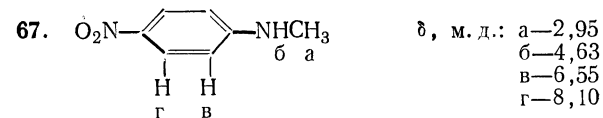
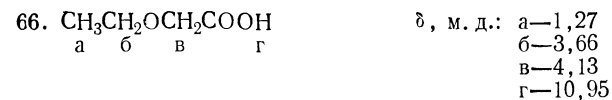
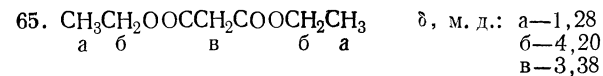
54. Поскольку химические сдвиги протонов в группах CHCl , CH_2Cl находятся выше 3,0 м. д., то из приведенного спектра следует, что такие группировки в соединении отсутствуют. Следовательно, хлор присоединен к третичному атому углерода, т. е. соединение имеет структуру

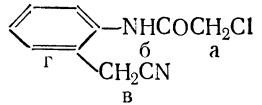
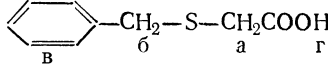
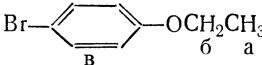


55. Положение триплета с $\delta = 1,08$ м. д. может соответствовать только метильной группе; расщепление этого сигнала в триплет может быть обусловлено наличием соседней метиленовой группы. Следовательно, кислота имеет фрагмент CH_3CH_2 и является α -броммасляной кислотой:



Дублет протонов «г» накладывается на мультиплет протонов «б».



75. а) $(\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O})_3\text{CH}$
 $\begin{array}{c} \text{а} \quad \text{б} \quad \text{в} \end{array}$
 δ , м. д.: а—1,1—1,3 (триплет)
 б—2,3—3,6 (квартет)
 в—5,3 (синглет)
- б) $\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$
 $\begin{array}{c} \text{в} \quad \text{б} \quad \text{а} \end{array}$
 δ , м. д.: а—1,1—1,3 (триплет)
 б—3,9—4,3 (квартет)
 в—1,9—2,2 (синглет)
- в) $(\text{CH}_2)_2\text{CHCH}_2\text{Br}$
 $\begin{array}{c} \text{а} \quad \text{б} \quad \text{в} \end{array}$
 δ , м. д.: а—1,1—1,3 (дублет)
 б—1,7—1,8 (мультиплет)
 в—3,2—3,6 (дублет)
- г) 
 δ , м. д.: а—4,3 (синглет)
 б—положение сигнала предсказать нельзя
 в—3,7 (синглет)
 г—около 7
- д) 
 δ , м. д.: а—3,4 (синглет)
 б—3,7 (синглет)
 в—7
 г—10—11
- е) $\text{C}_6\text{H}_5\text{N}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{C}-\text{CH}_3$
 $\begin{array}{c} \text{д} \quad \text{в} \quad \text{б} \quad \text{а} \\ \text{CH}_3 \quad \text{O} \end{array}$
 δ , м. д.: а—1,9—2,2 (синглет)
 б—2,0—2,4 (триплет)
 в—3,3—3,4 (триплет)
 г—2,8—3,1 (синглет)
 д—около 7
- ж) 
 δ , м. д.: а—1,1—1,3 (триплет)
 б—3,9—4,3 (квартет)
 в—около 7
- з) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHBrCOOCH}_2\text{CH}_3$
 $\begin{array}{c} \text{а} \quad \text{б} \quad \text{в} \quad \text{г} \quad \text{д} \end{array}$
 δ , м. д.: а—0,8—1,4 (триплет)
 б—1,7—2,0 (мультиплет)
 в—4,1 (триплет)
 г—3,9—4,3 (квартет)
 д—1,1—1,3 (триплет)

76. $\text{C}_6\text{H}_5\text{NHCOCH}_2\text{COCH}_3$
 $\begin{array}{c} \text{г} \quad \text{в} \quad \text{б} \quad \text{а} \end{array}$
 ИК: 3226 см^{-1} — ν_{NH}
 1706 см^{-1} — ν_{CO} кетона
 1665 см^{-1} —полоса «Амид I»
 1540 см^{-1} —полоса «Амид II»
 1375 см^{-1} — δ_{CH_3}
 $\left. \begin{array}{l} 1600 \text{ см}^{-1} \\ 1500 \text{ см}^{-1} \\ 1450 \text{ см}^{-1} \end{array} \right\}$ ароматическое кольцо
 $\left. \begin{array}{l} 750 \text{ см}^{-1} \\ 688 \text{ см}^{-1} \end{array} \right\}$ монозамещенное бензольное кольцо

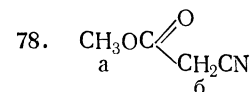
Полоса 750 см^{-1} может быть отнесена и к δ_{NH} .

ПМР (δ , м. д.): а—2,17 (синглет)
 б—3,52 (синглет)
 в—9,34 (синглет)
 г—7,4 (мультиплет)

77.

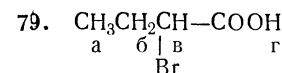
ИК: 2920 см^{-1} — ν_{CH}
 2200 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$
 1430 см^{-1} — δ_{CH_2}

ПМР (δ , м. д.): 2,72— CH_2 —S (триплет)
 2,88— CH_2 —CN (триплет)



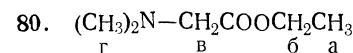
ИК: 1740 см^{-1} — ν_{CO}
 2240 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$

ПМР (δ , м. д.): а—3,85
 б—3,50



ИК: 3100—2800 см^{-1} — ν_{OH}
 1720 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{O}}$

ПМР (δ , м. д.): а—1,08 (триплет)
 б—2,07 (мультиплет)
 в—4,23 (триплет)
 г—10,97 (синглет)



ИК: 1735 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{O}}$

ПМР (δ , м. д.): а—1,30 (триплет)
 б—4,21 (квадруплет)
 в—3,20 (синглет)
 г—2,38 (синглет)

81. Первый вопрос, который следует решить в поставленной задаче,— в какой форме находится азот в исследуемом соединении. Поскольку в ИК-спектре наблюдаются две полосы поглощения: при 3480 и 3390 см^{-1} , которые можно отнести за счет валентных колебаний N—H, то азот в соединении находится в форме первичной аминогруппы NH_2 . Соотношение углерода и водорода указывает на то, что соединение имеет бензольное кольцо. Вопрос о том, каким образом связано бензольное кольцо с аминогруппой, можно решить при помощи УФ-спектров. Наличие в УФ-спектрах полосы поглощения в области 260 нм с колебательной структурой и значением $\lg \epsilon$ между 2 и 3 говорит о том, что бензольное кольцо не сопряжено с неподеленными электронами атома азота. Следовательно, исследуемое соединение является бензиламином $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{NH}_2$.

82. Азот в соединении находится в форме первичной аминогруппы, поскольку в области 3500—3300 см^{-1} имеются две резкие полосы поглощения. Согласно брутто-формуле соединение содержит бензольное кольцо. Бензольное кольцо и аминогруппа связаны непосредственно, так как в УФ-спектре наблюдаются две полосы поглощения — коротковолновая полоса около 230 нм ($\lg \epsilon$ около 4) и более длинноволновая ($\lambda_{\text{макс}}=290$ нм, $\lg \epsilon=3,3$), по положению и интенсивности отвечающая поглощению бензольного кольца, связанного с группами, атомы которых содержат неподеленные пары электронов. Следовательно, соединение имеет строение $\text{CH}_3-\text{C}_6\text{H}_4-\text{NH}_2$. Электронные спектры изомерных толуидинов весьма близки, вследствие чего сравнение спектра исследуемого соединения с литературными данными не позволяет решить вопрос о том, с каким из изомеров мы имеем дело. Информацию о замещении можно получить из ИК-спектров.

83. $\text{CH}_3\text{COC}_2\text{H}_5$ и $\text{C}_3\text{H}_7\text{CHO}$.

84. $(\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2)_2\text{O}$ и $\text{C}_6\text{H}_5\text{C}_6\text{H}_4\text{OC}_2\text{H}_5$.

85. По приведенным данным можно определить, что в одном случае имеется сопряженный кетон, в другом мы имеем дело с кетоном, в котором карбонильная группа и двойная связь не сопряжены. Строение углеводородных радикалов может быть определено по спектрам ПМР.

86. $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2 \xrightarrow{h\nu} \text{C}_6\text{H}_5\text{CH}=\text{CHCH}_3$,

87. $\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$ и $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{OH}$.

88. Замещенная бензойная кислота и кислота, в которой карбоксильная группа не имеет непосредственной связи с бензольным кольцом. Информацию

о характере и положении заместителей можно получить из полных ИК-спектров и спектров ПМР.

89. $C_6H_5CH_2COOH$ и $C_6H_5COOCH_3$

90. 1 — аллилбензол; 2 — пропенилбензол; 3 — 1-фенилпентадиен-1,3.

С удлинением сопряженной цепи полосы поглощения смещаются в длинноволновую область и их интенсивность возрастает.

91. 1 — β -ирион; 2 — α -ирион.

92. Взаимодействие неподеленной пары электронов атома кислорода с π -электронами ароматического кольца вызывает в спектре увеличение интенсивности длинноволновой полосы и ее bathochromic смещение.

93, 94. Наибольшее сопряжение осуществляется в копланарных структурах. Введение заместителей, нарушающих копланарность, вызывает гипсохромное и гипсохромное смещение полос поглощения.

95. 1 — гексан; 2 — спирт; 3 — щелочь.

96. 1 — вода; 2 — этанол; 3 — гексан.

97. 1 — циклогексан; 2 — вода.

98. 1 — вода; 2 — спирт; 3 — гексан.

99. 1 — кислый водно-спиртовой раствор; 2 — спирт.

100. 2 — кислый раствор; 3 — щелочной раствор.

101. В кислоте.

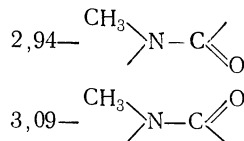
102. ИК: 1760 см^{-1} — $\nu_{C=O}$
 1645 см^{-1} — $\nu_{C=C}$
 1430 см^{-1} } — δ_{CH_3}
 1370 см^{-1} }
 980 см^{-1} } — δ_{CH}
 950 см^{-1} }
 870 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): $2,12$ — CH_3
 $4,55$ }
 $4,85$ } $H \rightarrow C =$
 $7,25$ — $C \begin{matrix} H \\ O- \end{matrix}$

УФ: Имеющееся поглощение связано с сложноэфирной группой.

103. ИК: 2940 см^{-1} — ν_{CH_3}

1650 см^{-1} — полоса «Амид I» ПМР (δ , м. д.): $2,08$ — CH_3CO



УФ: Поглощение вызвано амидной группой.

104. $CH_3CH_2O-C_6H_4-NHCOCH_3$
 $\begin{matrix} a & b & & v & g & d \end{matrix}$

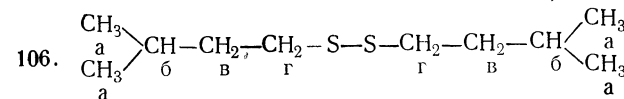
ИК: 3280 см^{-1} — ν_{NH}
 2940 см^{-1} — ν_{CH}
 1639 см^{-1} — полоса «Амид I»
 1600 см^{-1} } — ароматическое
 1500 см^{-1} } кольцо
 1450 см^{-1} }
 1450 см^{-1} } — δ_{CH} алиф
 1370 см^{-1} }
 830 см^{-1} — деформационные
колебания CH пара-заме-
щенного бензольного
кольца
 740 см^{-1} — δ_{NH}

ПМР (δ , м. д.): a — $1,38$ (триплет)
 b — $4,00$ (квадруплет)
 v — $6,83$ — $7,41$
 g — $7,91$
 d — $2,12$ (синглет)

105. $C_6H_5CH_2C(=O)CH_2C_6H_5$
 $\begin{matrix} b & a & & a & b \end{matrix}$

ИК: 1710 см^{-1} — $\nu_{C=O}$

ПМР (δ , м. д.): a — $3,72$
 b — $7,3$



ИК: 2960 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1464 см^{-1} — δ_{CH_2} и δ_{CH_3}
 1381 см^{-1} } δ_{CH_3} — разветвление
 1364 см^{-1} } цепи

ПМР (δ , м. д.): a — $0,9$ (дублет)
 b } — $1,55$ (мультиплет)
 v }
 g — $2,65$ (триплет)

УФ-спектр подтверждает дисульфидную структуру.

107. $HOCH_2CH_2SH$
 $\begin{matrix} g & v & b & a \end{matrix}$

ИК: 3367 см^{-1} — ν_{OH}
 1050 см^{-1} — колебания с участием
связи $C-O-H$
 2558 см^{-1} — ν_{SH}
 2940 см^{-1} — ν_{CH_2}

ПМР (δ , м. д.): a — $1,52$ (триплет)

Протон группы SH не способен к быстрому обмену, вследствие чего он расщепляется на соседней метиленовой группе ($J=8\text{ гц}$).

b — $2,7$ (мультиплет)

Протоны « b » расщепляются на протоне группы SH с константой $J=8\text{ гц}$ и каждый из пиков дублета расщепляется на триплет с $J=6\text{ гц}$.

v — $3,73$ (триплет)

На сигнал протонов « v » накладывается со стороны высоких полей сигнал протона группы OH .

108. $CH_3COCH_2CH_2COOH$
 $\begin{matrix} a & b & v & g \end{matrix}$

ИК: 3330 — 2300 см^{-1} — ν_{OH} связ
 1715 см^{-1} — $\nu_{C=O}$

УФ: Полоса поглощения низкой интенсивности ($\lg \epsilon=1,5$) свидетельствует о переходе $n \rightarrow \pi^*$ и может быть связана с поглощением кетонной группы.

ПМР (δ , м. д.): a — $2,15$ (синглет)
 b } — $2,61$ (искаженный триплет)
 v }
 g — $11,0$

109. $CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2CHO$
 $\begin{matrix} a & b & v & g & d & e & ж \end{matrix}$

ИК: 1730 см^{-1} — $\nu_{C=O}$ альд
 2730 см^{-1} — ν_{CH} альд
 2960 см^{-1} } — ν_{CH_2} и ν_{CH_3}
 2940 см^{-1} }

УФ: Полоса поглощения низкой интенсивности ($\epsilon=23,2$) говорит о переходе $n \rightarrow \pi^*$ и может быть связана с поглощением альдегидной группы.

ПМР (δ , м. д.): а — 0,89 (искаженный триплет)

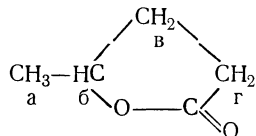
б
в
г
д } 1,1—2,0 (мультиплет)

Одинаковые константы спин-спинового взаимодействия протонов «б», «в», «г», «д» обуславливают сложную структуру спектра.

е — 2,42 (мультиплет)

Протоны группы CH_2 расщепляются на соседней метиленовой группе и на альдегидном протоне.

110. ж — 9,75 (триплет)



ИК: 1780 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{O}}$
1170 см^{-1} — колебание с участием группы $\text{C}-\text{O}-\text{C}$

УФ: Указывает на отсутствие сопряженной системы.

ПМР (δ , м. д.): а — 1,35 (дублет)
б — 4,58 (мультиплет)
в
г } 1,7—2,4 (мультиплет)

111. ИК: поглощение в области 750—650 см^{-1} может принадлежать колебаниям с участием $\text{C}-\text{Cl}$. Остальная часть спектра соответствует валентным и деформационным колебаниям CH алифатической цепи.

УФ: полигалогениды алифатических соединений имеют полосы поглощения малой интенсивности до 250 нм.

ПМР: существенное искажение дублета и квинтета объясняется малой величиной отношения $\frac{\delta_2 - \delta_1}{J}$.

112. Наличие ароматической системы определяется в ИК-спектре по поглощению в области $\text{C}-\text{H}$ -валентных колебаний, поглощению между 1667 и 1429 см^{-1} , отвечающему скелетным колебаниям ароматических колец и интенсивным полосам поглощения между 1000 и 715 см^{-1} . Поглощение при 750 см^{-1} обусловлено колебаниями, в которых принимает участие связь $\text{C}-\text{Cl}$. Поглощение при 3413 см^{-1} связано с $\nu_{\text{N}-\text{H}}$.

УФ: система полос поглощения высокой интенсивности свидетельствует о конденсированном ароматическом соединении.

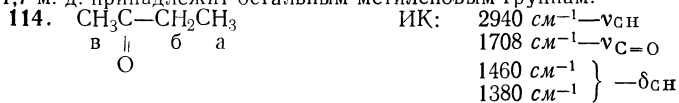
ПМР: протон иминогруппы проявляется при $\delta=7,4$ м. д. Сложный мультиплет в спектре при 6,4—7,1 принадлежит протонам бензольного и пиррольного колец.

Определить положение атома Cl по приведенным спектрам нельзя.

113. Интенсивная полоса поглощения в ИК-спектре при 1669 см^{-1} и сильное поглощение в области 3448 и 3077 см^{-1} говорят об амидной группировке. Отсутствие полосы «Амид II» свидетельствует о вторичном амиде (или лактаме). Длинноволновая широкая полоса в области 800—700 см^{-1} также подтверждает группу $\text{N}-\text{H}$ (неплоские деформационные колебания NH).

Группа $\text{N}-\text{H}$ подтверждается и спектрами ПМР — размытый сигнал при $\delta=8,2$ м. д.

В спектре ПМР сигнал при $\delta=3,2$ м. д. относится к протонам группы CH_2 у атома азота, при $\delta=2,3$ м. д. к группе CH_2 при $\text{C}=\text{O}$, и, наконец, сигнал с $\delta=1,7$ м. д. принадлежит остальным метиленовым группам.



ИК: 2940 см^{-1} — ν_{CH}
1708 см^{-1} — $\nu_{\text{C}=\text{O}}$
1460 см^{-1} } — δ_{CH}
1380 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): а — 1,05 (триплет)
б — 2,47 (квадруплет)
в — 2,13 (синглет)

УФ: Поглощение вызвано переходом $n \rightarrow \pi^*$ карбонильной группы

115. $\text{BrCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$ ИК: 2941 см^{-1} — ν_{CH}
а б в 2240 см^{-1} — ν_{CN}
1440 см^{-1} — δ_{CH_2}

ПМР (δ , м. д.): а — 3,53 (триплет)
б — 2,23
в — 2,58

116. $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$ ИК: 3280 см^{-1} — ν_{OH}
а б в 2940 см^{-1} — ν_{CH}
1460 см^{-1} — δ_{CH}
1375 см^{-1} } — $\delta_{\text{C}(\text{CH}_3)_2}$
1355 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): а — 1,20 (дублет)
б — 4,0 (мультиплет)
в — 1,60

117. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ ИК: 3330 см^{-1} — ν_{OH}
а б в г 2940 см^{-1} — ν_{CH}
1460 см^{-1} } — δ_{CH}
1380 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): а — 0,92 (триплет)
б — 1,57 (мультиплет)
в — 3,58 (триплет)
г — 2,28

118. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NO}_2$ ИК: 2980 см^{-1} — ν_{CH}
а б в 1563 см^{-1} } — ν_{NO_2}
1385 см^{-1} }
1470 см^{-1} } — δ_{CH}
1440 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): а — 1,03 (триплет)
б — 2,07 (мультиплет)
в — 4,38 (триплет)

УФ: полоса перехода $n \rightarrow \pi^*$ нитрогруппы

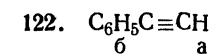
119. $(\text{CH}_3)_2\text{CHCN}$ ИК: 2960 см^{-1} — ν_{CH}
а б 2230 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$
1460 см^{-1} — δ_{CH}
1390 см^{-1} } — $\delta_{\text{C}(\text{CH}_3)_2}$
1370 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): а — 1,33 (дублет)
б — 2,72 (мультиплет)

120. $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CN}$ ИК: 2870 см^{-1} — ν_{CH}
а б в 2220 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{N}}$
1465 см^{-1} } — δ_{CH}
1420 см^{-1} }
1380 см^{-1} — δ_{CH_3}

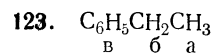
ПМР (δ , м. д.): а — 3,40 (синглет)
б — 3,62 (триплет)
в — 2,62 (триплет)

121. $\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{CH}(\text{Cl})-\text{NO}_2$ ИК: 2985 см^{-1} — ν_{CH}
а б в 1560 см^{-1} } — ν_{NO_2}
1365 см^{-1} }
1460 см^{-1} — δ_{CH}



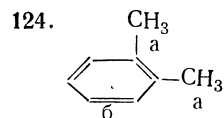
ПМР (δ , м. д.): а — 1,10 (триплет)
 б — 2,32 (мультиплет)
 в — 5,80 (триплет)
 УФ: переход $n \rightarrow \pi^*$ нитрогруппы
 ИК: 3310 см^{-1} — ν_{CH}
 3058 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2083 см^{-1} — $\nu_{\text{C}\equiv\text{C}}$
 1600 см^{-1} } — бензольное
 1575 см^{-1} } кольцо
 1490 см^{-1} }
 1445 см^{-1} }
 758 см^{-1} } деформационные колебания монозамещенного бензольного кольца
 690 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): а — 3,05
 б — ~7,4
 УФ: полоса с $\lg \epsilon > 4$ относится к сопряженной системе, полоса с $\lg \epsilon \sim 2,5$ и с колебательной структурой — бензольная полоса



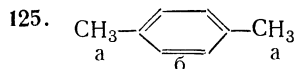
ИК: 3030 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2940 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1600 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1500 см^{-1} }
 1455 см^{-1} }
 745 см^{-1} } — монозамещенное бензольное кольцо
 695 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): а — 1,25 (триплет)
 б — 2,68 (квадруплет)
 в — ~7,2



УФ: полоса алкилбензолов
 ИК: 3012 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2924 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1600 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1500 см^{-1} }
 1460 см^{-1} }
 1460 см^{-1} } — δ_{CH_3}
 1380 см^{-1} }
 740 см^{-1} — деформационные колебания СН орто-замещенного бензольного кольца

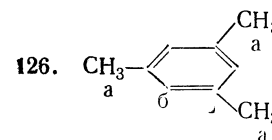
ПМР (δ , м. д.): а — 2,25
 б — ~7,1
 УФ: бензольное кольцо.



ИК: 2985 см^{-1} } — ν_{CH} алиф
 2941 см^{-1} }
 1504 см^{-1} — бензольное кольцо
 1460 см^{-1} } — δ_{CH_3}
 1375 см^{-1} }

795 см^{-1} — деформационные колебания СН пара-замещенного бензольного кольца

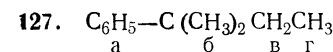
ПМР (δ , м. д.): а — 2,30
 б — ~7,1
 УФ: бензольное кольцо



ИК: 2885 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1600 см^{-1} } — ароматическое
 1500 см^{-1} } кольцо
 1460 см^{-1} }
 1460 см^{-1} } — δ_{CH_3}
 1370 см^{-1} }
 840 см^{-1} — деформационные колебания СН бензольного кольца

ПМР (δ , м. д.): а — 2,25
 б — 6,78

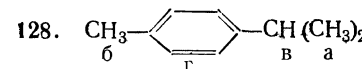
УФ: бензольная полоса



ИК: 759 см^{-1} } — монозамещенное бензольное кольцо
 696 см^{-1} }
 3030 см^{-1} — ν_{CH} аром
 1600 см^{-1} } — скелетные колебания бензольного кольца
 1493 см^{-1} }
 2925 см^{-1} — ν_{CH_3}
 1377 см^{-1} } — гем-диметильная группа
 1361 см^{-1} }

УФ: поглощение несопряженных бензольных соединений

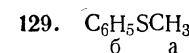
ПМР (δ , м. д.): а — 7,2
 б — 1,25 (синглет)
 в — 1,60 (квартет)
 г — 0,65 (триплет)



ИК: 2900 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1515 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1465 см^{-1} }
 1382 см^{-1} } — $\delta_{\text{C}(\text{CH}_3)_2}$
 1368 см^{-1} }
 812 см^{-1} — деформационные колебания СН пара-замещенного бензольного кольца

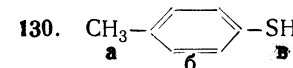
ПМР (δ , м. д.): а — 1,22 (дублет)
 б — 2,30 (синглет)
 в — 2,87 (мультиплет)
 г — 7,08

УФ: бензольная полоса

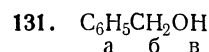


ИК: 3070 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2930 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1600 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1480 см^{-1} }
 1430 см^{-1} — δ_{CH_3}
 735 см^{-1} } — деформационные колебания СН моно-замещенного бензольного кольца
 690 см^{-1} }

ПМР (δ , м. д.): а — 2,47
 б — 7,3



ИК: 3030 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2900 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 2550 см^{-1} — ν_{SH}



805 см^{-1} — деформационные колебания СН пара-замещенного кольца
 ПМР (δ , м. д.): а — 2,30
 б — 7,2
 в — 3,27
 УФ: полоса 280 нм с $\lg \epsilon = 2,8$ — бензольная полоса, увеличенная по интенсивности за счет взаимодействия π -электронов бензола с электронами серы

ИК: 3330 см^{-1} — ν_{OH}
 3030 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2860 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1610 см^{-1}
 1500 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1450 см^{-1}

ПМР (δ , м. д.): а — 7,28
 б — 4,58
 в — 2,43
 УФ: полоса алкилбензолов

ИК: 3330 см^{-1} — ν_{OH}
 1600 см^{-1}
 1500 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1460 см^{-1}
 850 см^{-1} } — деформационные колебания СН мета-замещенного бензольного кольца
 775 см^{-1}
 685 см^{-1}

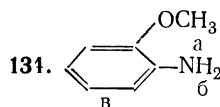
ПМР (δ , м. д.): а = 2,25
 б — ~7
 в — 5,67

УФ: полоса, характерная для фенолов

ИК: 3020 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2940 см^{-1} } — ν_{CH} алиф
 2857 см^{-1}
 1600 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1500 см^{-1}
 755 см^{-1} } — деформационные колебания СН монозамещенного бензольного кольца
 695 см^{-1}

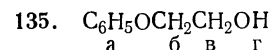
ПМР (δ , м. д.): а — 3,78
 б — ~7

УФ: поглощение, характерное для системы $\text{C}_6\text{H}_5\text{—O—}$



ИК: 3440 см^{-1} } — ν_{NH_2}
 3340 см^{-1}
 2941 см^{-1} } — ν_{CH}
 2840 см^{-1}
 1612 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1502 см^{-1}

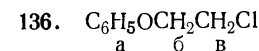
ПМР (δ , м. д.): а — 3,85
 б — 3,73
 в — ~6,8



ИК: 3330 см^{-1} — ν_{OH}
 3030 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2940 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1600 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1500 см^{-1}
 755 см^{-1} } — деформационные колебания СН монозамещенного бензольного кольца
 690 см^{-1}

ПМР (δ , м. д.): а — ~7,2
 б — } 3,97
 в — }
 г — 2,65

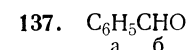
УФ: поглощение системы $\text{C}_6\text{H}_5\text{—O—}$



ИК: 3070 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2940 см^{-1} — ν_{CH} алиф
 1600 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1500 см^{-1}
 755 см^{-1} } — деформационные колебания СН монозамещенного бензольного кольца
 690 см^{-1}

ПМР (δ , м. д.): а — ~7,0
 б — 4,22
 в — 3,78

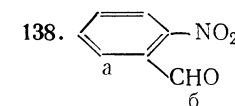
УФ: поглощение, характерное для системы $\text{C}_6\text{H}_5\text{—O—}$



ИК: 3030 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2793 см^{-1} } — ν_{CH} альд
 2755 см^{-1}
 1700 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
 1600 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1582 см^{-1}
 1450 см^{-1}

ПМР (δ , м. д.): а — ~7,8
 б — 10,00

УФ: полоса 330 нм — $n \rightarrow \pi^*$ -полоса; полоса ~280 нм — бензольная полоса; полоса 240 нм — $\pi \rightarrow \pi^*$ -полоса

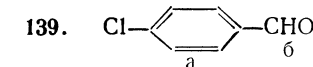


ИК: 2860 см^{-1} — ν_{CH} альд
 1695 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
 1515 см^{-1} } — ν_{NO_2}
 1351 см^{-1}

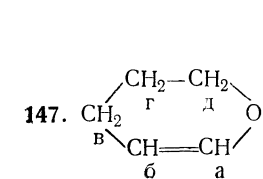
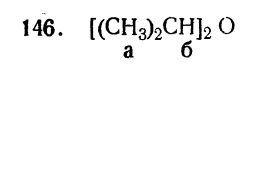
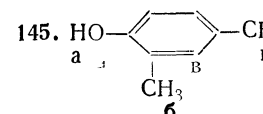
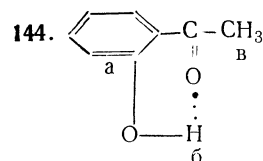
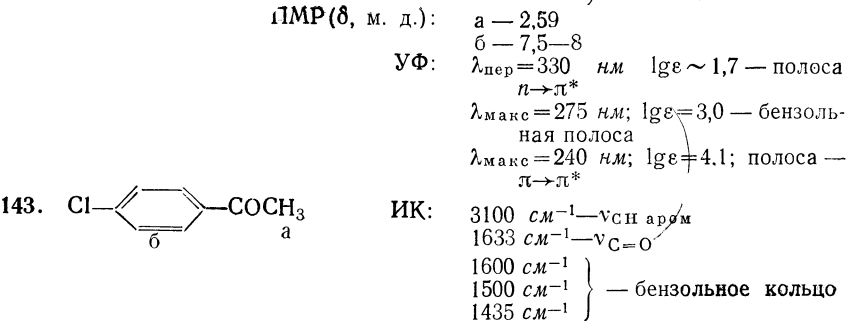
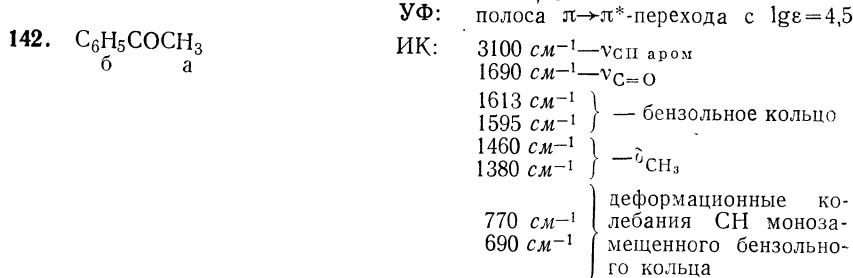
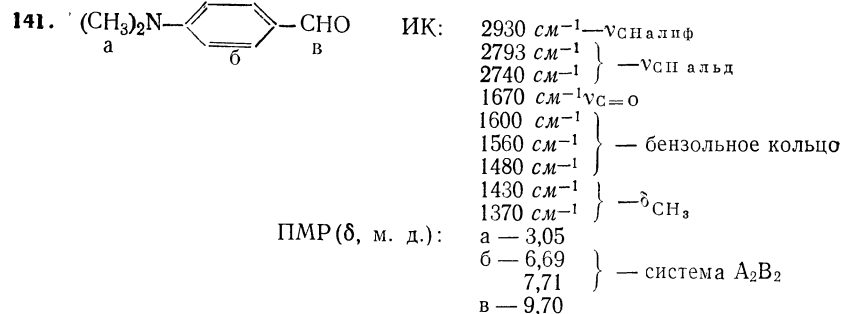
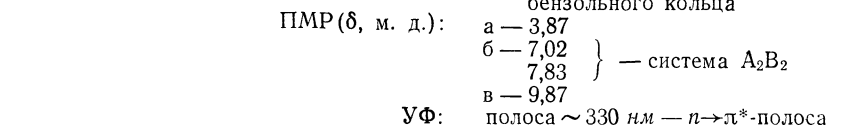
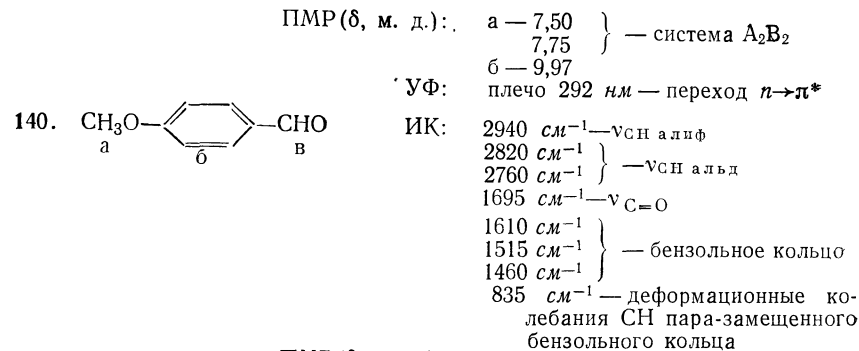
Положение заместителей определить невозможно, так как в область 900—700 см^{-1} попадают полосы нитрогруппы.

ПМР (δ , м. д.): а — 7,9
 б — 10,43

УФ: спектр нитробензолов



ИК: 3050 см^{-1} — ν_{CH} аром
 2780 см^{-1} — ν_{CH} альд
 1690 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$
 1600 см^{-1} } — бензольное кольцо
 1480 см^{-1}
 830 см^{-1} — деформационные колебания СН пара-замещенного бензольного кольца



			1241 см^{-1} } — колебания, свя-	
			1064 см^{-1} } занные с груп-	
			730 см^{-1} — неплоские деформа-	
			ционные колебания CH <i>цис-</i>	
			формы	
ПМР (δ , м. д.):	а — 6,20	} $J=7$ <i>гц</i> — <i>цис</i> -оле-		
	б — 4,55		финовые протоны	
	в			
	г	} — 1,9 (мультиплет)		
	д — 3,9		(триплет)	
143. $(\text{CH}_3)_2\text{N}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OOCCH}_3$ ИК:	а	} ν_{CH} алиф		
	б			
	в	2780 см^{-1} — ν_{CH} в $\text{N}-\text{CH}_3$		
	г	1748 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$		
		1460 см^{-1} } — δ_{CH} алиф		
		1370 см^{-1} } — δ_{CH} алиф		
		1235 см^{-1} } — колебания, свя-		
		1042 см^{-1} } занные с груп-		
			пой $\text{C}-\text{O}-\text{C}$	
	ПМР (δ , м. д.):	а — 2,2	(синглет)	
	б — 2,45	(триплет)		
	в — 4,05	(триплет)		
	г — 1,95	(синглет)		
149. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$ ИК:	а	} ν_{CH} алиф		
	б			
	в	2780 см^{-1} — ν_{CH} в $\text{N}-\text{CH}_3$		
	г	1748 см^{-1} — $\nu_{\text{C=O}}$		
	д	1460 см^{-1} } — δ_{CH} алиф		
	е	1370 см^{-1} } — δ_{CH} алиф		
		1235 см^{-1} } — колебания, свя-		
		1042 см^{-1} } занные с груп-		
			пой $\text{C}-\text{O}-\text{C}$	
	ПМР (δ , м. д.):	а — 0,9	(триплет)	
	б	} — 1,5 (мультиплет)		
	в			
	г			
	д — 2,3	(триплет)		
	е — 10,5	(синглет)		

ЛИТЕРАТУРА

а) Рекомендуемая литература

1. Бабушкин А. А. и др. Методы спектрального анализа. Изд-во МГУ, 1962.
2. Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул ИЛ, М., 1963.
3. Бранд Дж., Эггилтон Г. Применение спектроскопии в органической химии. «Мир», 1967.
4. Грибов Л. А. Введение в теорию и расчет колебательных спектров многоатомных молекул. Изд-во ЛГУ, 1965.
5. Ионин Б. И., Ершов Б. А. ЯМР спектроскопия в органической химии. «Химия», Л., 1967.
6. Маянц Л. С. Теория и расчет колебаний молекул. Изд-во АН СССР, М., 1960.
7. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. «Мир», М., 1965.
8. Рао Ч. Н. Электронные спектры в химии. «Мир», М., 1964.
9. Эмсли Дж., Финей Дж., Сатклиф Л. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса высокого разрешения. «Мир», М., 1968.
10. Н. Н. Jaffe, M. Orchin. Theory and Applications of Ultraviolet Spectroscopy. London, 1964.
11. Hiroshi Suzuki. Electronic Absorption Spectra and Geometry of Organic Molecules. London, 1967.

б) Справочники

1. Кусаков М. М., Шиманко Н. А., Шишкина М. В. Ультрафиолетовые спектры поглощения ароматических углеводов. Изд-во АН СССР, М., 1963.
2. Landolt—Börnstein. Atom und Molekularphysik, 1 Band, 3 Teil, Springer, Berlin, 1951.
3. Friedel R. A., Orchin M. Ultraviolet Spectra of Aromatic Compounds, N.-Y. — London, 1951.
4. Hershenson H. Ultraviolet and Visible Absorption Spectra, v. 1, 1930—1954, v. 2, 1955—1959 Acad. Press, N.-Y. — London.
5. Hershenson H. Infra-red absorption Spectra, Acad. Press, N.-Y. — London, 1959.
6. Sadtler Standard Spectra. Y. R. Sadtler and Sons, Philadelphia.

I. СВОДНАЯ ТАБЛИЦА ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ГРУППОВЫХ ЧАСТОТ

Частота, см^{-1}	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
4400 ИК ИК ИК 3687	КР ИК ИК ИК	Валент. Н—Н Валент. Н—F Валент. свободной—О—Н	H ₂ (газ) HF (газ) Пары одноатомных спиртов	— — —	Отсутствует в ИК Резкая »
3636—3610	ИК	Валент. свободной—О—Н	Разбавленные растворы одноатомных спиртов	—	Широкая одна или две полосы
3636—3150	КР	Валент.—О—Н	Гидратированные соли	—	Резкая
3634—3619	ИК	Валент. свободной—О—Н	Разбавленные растворы двухатомных спиртов	—	Резкая
3623	ИК	Валент. свободной—О—Н	Димеры спиртов, связанные одной связью	—	Широкая
3602—3544	ИК	Валент. связанной—О—Н	Внутримолекулярная водородная связь в диолах	—	Резкая
3544—3502	ИК	Валент. связанной—О—Н	Димеры спиртов с разветвленной цепью	—	»
3530	ИК	Асимм. валент. свободной—NH ₂	Разбавленные растворы первичных амидов	130	Резкая
3520	ИК	Валент. свободной—О—Н	Разбавленные растворы карбоновых кислот в CCl ₄	—	»
3500 3500—3495	ИК ИК	Валент. связанной—О—Н Валент. связанной—О—Н	Кётоспирты, окснэфиры Димеры спиртов с одной связью	—	Широкая, иногда дублет
3500	ИК	Асимм. валент. свободной—NH ₂	Разбавленные растворы первичных аминов	—	—
3500	ИК	Валент. свободной NH	N—Арилвторичные амиды	—	—
3500—3400	ИК	Валент. свободной NH	Вторичные амины	Колеблется в широких пределах	—

Продолжение табл.

Частота, см^{-1}	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
3498	ИК	Валент. связанной—NH ₂	Первичные амиды	Сильная	Более слабые полосы при 3345, 3300 и 3180
3470—3410 3470—3400	ИК ИК ИК	Валент. связанной—NH ₂ Валент. свободной—NH	Первичные амины Разбавленные растворы вторичных амидов в CHCl ₃	— —	Широкая —
3415	ИК	Симм. валент. свободной—NH ₂	Разбавленные растворы первичных амидов	120	—
3400	ИК	Симм. валент. свободной—NH ₂	Разбавленные растворы первичных амидов	—	—
3400 3374	ИК КР	Обертон. валент.—C=O	Ацетилен (газ)	Слабая	Отсутствует в ИК
3360—3320 3356	ИК ИК	Обертон валент.—O—N=O Валент. связанной—O—H	Нитрозосоединения Спирты, связанные многими связями	— Сильная	— —
3345	ИК	Валент. связанной—NH ₂	Первичные амиды	—	Другие полосы при 3498, 3300 и 3180
3300	ИК	Валент. связанной—NH ₂	Первичные амиды	—	Другие полосы при 3498, 3345 и 3180
3312 3305—3270	ИК ИК, КР	Валент. ≡C—H Валент. ≡C—H	HCN Монозамещенные алкены	100	—
3300—3280	ИК	Валент. связанной NH	N-Монозамещенные амиды	—	Также у полипептидов и протеинов
3287 3200—2500	ИК ИК	Асимм. валент. ≡C—H Валент. связанной—O—H	Ацетилен (газ) Димеры карбоновых кислот, внутрикомплексные соединения и т. д.	— —	Отсутствует в КР Очень широкая
3182	ИК	Валент. связанной—NH ₂	Первичные амиды	Сильная	Другие полосы при 3498, 3345, 3300
3108 3106	КР ИК	Валент. =C—H Валент. =C—H	Этилен (газ) Этилен (газ)	— —	Отсутствует в ИК Отсутствует в КР

Продолжение табл.

Частота, см^{-1}	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
> 3100	ИК	Валент. = C—H	—O—C=CH ₂	—	—
3100	ИК	Валент. связанной —O—H + —NH ₃	Гидратированные соли	—	Широкая
3100—3070	ИК	Валент. связанной N—H	Гидрохлориды аминокислот и пвритерионы N-Монозамещенные амиды	—	Широкая
3100—3060	ИК	Валент. связанной N—H	Ароматические соединения	20—60	Также у полипептидов и протеинов
3100—3000	ИК	Валент. = C—H	Пары бензола	—	—
3099	ИК	Валент. = C—H	RHC=CH ₂	25—35	—
3090—3080	ИК	Валент. = C—H	RR'C=CH ₂	25—30	—
3085—3075	ИК	Валент. = C—H	Моно-, ди- и тризамещенные бензолы	Сильная	—
3070—3045	КР	Валент. = C—H	CH ₂ X ₂ *	—	—
3065—3012	ИК	Асимм. валент. CH ₂	Бензол	Сильная	—
3062—3047	КР	Валент. C—H	CH ₃ X*	—	—
3060—2982	ИК	Асимм. валент. —CH ₃	Циклопропановое кольцо	—	—
3040	ИК	Асимм. валент. —CH ₂	CHX ₃ *	—	—
3040—3030	ИК	Валент. —C—H	RHC=CHR' (цис)	30—40	—
3030—3010	ИК	Валент. = C—H	RHC=CHR' (транс)	30—40	—
3027—3020	ИК	Валент. = C—H	Метан, газ	—	—
3020	ИК	Валент. = C—H	Этилен, газ	—	—
3019	КР	Валент. = C—H	CH ₂ X ₂ *	—	—
2988—2949	ИК	Симм. валент. CH ₂	CH ₃ X*	150 на каждую группу CH ₃	—
2972—2964	ИК	Симм. валент. CH ₃	Насыщенные углеводороды	20 на каждую группу CH ₃	—
2962	ИК	Асимм. валент. CH ₃	Метильная группа, соединения к бензольному кольцу	—	Отсутствует в ИК
2930—2920	ИК	Асимм. валент. CH ₃	—	—	—

* X — галоген.

Продолжение табл.

Частота, см^{-1}	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
2926	ИК	Асимм. валент. CH ₂	Насыщенные углеводороды	75 на каждую группу CH ₂	—
2890	ИК	Валент. C—H	Насыщенные углеводороды	Очень слабая	—
2880—2860	ИК	Симм. валент. CH ₃	Метильная группа, соединения к бензольному кольцу	—	—
2872	ИК	Симм. валент. CH ₃	Насыщенные углеводороды	90 на каждую группу CH ₃	Слабее в —O—CH ₃
2853	ИК	Симм. валент. CH ₂	Насыщенные углеводороды	45 на каждую группу CH ₂	—
2820	ИК	Валент. —CH ₃ (?)	—O—CH ₃ в алифатических соединениях	Слабая	—
2800—2000	ИК	Валент. NH ⁺ , NH ₂ ⁺ , NH ₃ ⁺	Солянокислые амины	—	—
2700—2560	ИК	Валент. связанной —O—H	Фосфорные оксикислоты	—	Слабая
2650—2400	ИК	Валент. —O—D	Дейтерированные спирты	—	—
2600—2550	ИК	Валент. —S—H	Алкилмеркаптаны	—	Слабая в ИК, сильнее в КР
2440—2350	ИК	Валент. —P—H	Фосфорные оксикислоты	—	—
2329	КР	Валент. —C≡N	Дициан	—	Отсутствует в ИК
2304	КР	Валент. —C≡C—	Диалкилацетилены	—	Вторая полоса при 2227
2270	ИК	Асимм. валент. —N=C=O	Алкилизоцианаты	1300—2000	Иногда две полосы
2260—2190	ИК	Валент. —C≡C—	Дизамещенные ацетилены	1	—
2258	ИК	Валент. —C—D	Тетрадейтерометан (газ)	—	—
2250	ИК, КР	Валент. —C≡N	Несопряженные нитрилы	—	—

Продолжение табл.

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
2240—2230 2238 2227	ИК ИК КР	Валент.—C≡N Валент.—C≡N Валент.—C≡C—	Бензонитрил Co(CN) ₂ Диалкилацетилены	— — —	— — Вторая полоса при 2304
2225 2207—2202 2200	ИК, КР ИК ИК	Валент.—C≡N Валент.—C≡C— Валент.—Si—H + Валент.—ND ₃	Сопряженные нитрилы Циклоацетилены Алкилсиланы	— — Очень сильная	— — —
2200—2160 2187 2183—2150 2183	КР КР ИК ИК	Симм. валент.—Si—H Валент.—N≡C Асимм. валент.—Si—H + Асимм. валент.—N=N=N ⁺	Силан, газ Алкилизоцианиды Силан, газ	— Сильная —	— — —
2169—2080 2168 2150 2149	КР ИК ИК ИК	Асимм. валент.—C=O Валент.—C≡C— Асимм. валент.—C≡N ⁺	Алкилазиды Окись углерода, газ Кетен Дициан	Сильная — Сильная —	— — Отсутствует в КР
2141 2140—2100 2125—2118	ИК ИК КР	Асимм. валент.—N=N=N ⁺ Валент.—C≡C— Валент.—C≡C— + N≡C ⁺	Метилазид Моноалкилацетилены Моноалкилацетилены	Сильная 5 Очень сильная	— — —
2123 2089 2080 2049 2043 2034 2030 2020	ИК ИК, КР ИК КР ИК ИК ИК ИК	Валент.—C≡N Валент.—C=O Валент.—C=C=O Валент.—C=O Валент.—C=O Валент.—C=O Валент.—C=O	Фенилизоцианид Синильная кислота Fe ₂ (CO) ₉ Кетен Fe(CO) ₄ Fe ₂ (CO) ₉ Ni(CO) ₄ , Fe(CO) ₅ Fe(CO) ₄	— — — Сильная — — — —	— — — — — — — —
2000—1650	ИК	Обертонны и комбинационные тоны	Производные бензола	1—10	Слабые, но харак- теристические

Продолжение табл.

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1980 1974 1942 1835—1820 1833 1828 1820—1650	ИК, КР КР ИК ИК ИК ИК ИК, КР	Асимм. валент.—C=C=C— Валент.—C≡C— Валент.—C=O Обертон деф.—C—H Валент.—C=O Валент.—C=O Валент.—C=O	Аллен и его производ- ные Ацетилен (газ) F ₂ CO RHC=CH ₂ Fe(CO) ₄ Fe ₂ (CO) ₉ Карбонильные соедине- ния RR'C=CH ₂ — Алкилэфиры азотистой кислоты транс-Конфигурации сложных эфиров азотной кислоты	Сильная в ИК и КР Очень сильная — — — — 250—1250 — — — — —	— — — — — — — — — — — —
1790—1785 1750 1736 1680—1650	ИК ИК ИК ИК	Обертон деф.—C—H Валент.—R—D Обертон валент.—O—N=O Валент.—N=O	— — — —	— — — —	— — — —
1680—1640 1680—1630	КР, ИК ИК	Валент.—C=C— Валент.—C=N	— —	— Умеренно силь- ная	Сильная в КР, сла- бая в ИК —
1678—1668 1675—1665 1675—1665	ИК ИК ИК	Валент.—C=C Валент.—C=C Валент.—C=C—	RHC=CHR' (транс) RR'C=CHR'' RR'C=CR''R'''	— — —	— — Отсутствует в ИК у симм. замещенных
1673 1670 1662—1652	ИК ИК ИК	Валент.—C=N— Валент.—C=N— Валент.—C=C—	R—CH=NR' Алифатические соеди- нения RHC=CHR' (цис)	— — 5—10	— — —
1658—1648 1654 1648—1638	ИК ИК ИК	Валент.—C=C— Валент.—C=N— Валент.—C=C—	RR'C=CH ₂ Ar—CH=NR RHC=CH ₂	30 — 25—45	Циклогексен 1646 Циклопентен 1611 Циклобутен 1571 — — —

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Огнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1640	КР	Валент.—O—N=O	Алкилнитриты	—	В спектре метилнитрита также 1603
1640	ИК	Валент.—C=N—	Оксимы	—	В твердом состоянии
1640—1628	ИК	Асимм. валент.—ON $\overset{\text{O}}{\parallel}$ C=O	Алкилнитраты	—	—
1640—1560	ИК	Ножничные—NH ₂	Первичные амины	—	—
1640—1535	ИК	Асимм. деф.—NH ₂ ⁺	Гидрохлориды аммиака и пиктерины	—	—
1640—1530	ИК	Валент.—C=O	Внутрикомплексные соединения, β-дикетоны, β-кетозиды	—	—
1637	ИК	Валент.—C=N—	Ag—CH=NAg	Очень сильная	Широкая
1630—1615	ИК	Деф. H—O—H	Кристаллизационная вода в гидратированных солях и т. д.	—	—
1625—1610	ИК	Валент. O—N=O	Алкилэферы азотистой кислоты	—	—
1610—1590	ИК, КР	Колебания кольца	Ароматические углеводороды	20—100	Сильная в КР
1590—1588	ИК	Деф.—N—H(?)	Разбавленные растворы первичных алкиламинов в CHCl ₃	180—210	В спектре кристаллов смешана до 1650—1620 (полоса «Амид II»)
1580—1490	ИК	Деф.—N—H(?)	Вторичные алкиламины	Слабая	—
1580—1475	ИК	Деф.—N—H	Нециклические N-монозамещенные амиды	—	Отсутствует в КР (полоса «Амид II»)
1577	ИК	Валент.—N=N—	Ароматические азосоединения	—	—
1576	ИК, КР	Валент.—N=N—	—	Слабая в ИК	—

Продолжение табл.

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1571	КР	Валент.—C=C—	Cl ₂ C=CCl ₂	Очень слабая в ИК	—
1570—1520	ИК, КР	Асимм. валент.—N—N =O	Алкилнитраминаы	—	—
1562—1470	ИК	Асимм. валент. C—N=O	Алкилнитросоединения	—	—
1560	ИК	Деф.—N—H(?)	N-Монозамещенные амиды (в твердом состоянии)	—	—
1560	ИК	Асимм. валент.—C—N =O	Алкилнитросоединения	—	—
1540—1520	ИК	Деф.—N—H(?)	N-Монозамещенные амиды (растворы в диоксане)	—	Полоса «Амид II»
1520—1490	ИК	Симм. деф.—NH ₃ ⁺	Гидрохлориды аминокислот и цвиттерионы	—	—
1518	ИК	Ag—N =O	Ароматические нитросоединения	—	—
1517	ИК	Валент. Ag—N=O	Производные нитробензола	—	—
1500—1480	ИК	Колебания кольца	Ароматические углеводороды	50—100	Слабая или отсутствует в КР
1470—1420	ИК	Асимм. деф.—CH ₃	Производные алкилбензолов	20—50	—
1467	ИК	Ножничные CH ₂	Линейные алифатические цепи	8 на группу CH ₂	—
1460	ИК, КР	Асимм. деф.—CH ₃	Алифатические углеводороды	—	—

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1455	ИК, КР	Ножничные CH ₂	Производные циклопентана	—	—
1452	ИК, КР	Ножничные CH ₂	Производные циклотексана	—	—
1450	ИК	Валент. F—H—F	Ион HF ₂	—	—
1450—1200	ИК, КР	Плоское деф. C—H в C=C—H	Замещенные этилены	—	—
1438—1436	ИК	Симм. деф.—CH ₃	Карбометоксиэфиры	Сильная в КР, слабая в ИК 100—150	—
1435—1405	ИК	Ножничные CH ₂	—CH ₂ —CO—	—	—
1435—1420	ИК	Валент.—C—OH(?)	Димеры карбоновых кислот	—	—
1434—1409	КР	Симм. валент.—N=C=O	Алкилизоцианаты	Сильная	—
1427—1420	ИК	Ножничные CH ₂ (?)	—CH ₂ —COOR	Слабая	—
1420—1416	ИК	Плоское деф. CH ₂ —C=C—H	RHC=CH ₂	10—20	—
1420—1410	ИК	Плоское деф. C—H в C=C—H	RR'C=CH ₂	Очень слабая	—
1411	КР	Асимм. валент.—S(=O)=O	Cl ₂ SO ₂	—	—
1410—1400	ИК	Плоское деф. C—H в —C=C—H	RCH=CHR' (цис)	10—20	—
1408—1351	ИК	Асимм. валент.—N=N=O	Алкилнитрозамины	Сильная полоса	Также при 1315, 1160
1406—1393	ИК	Симм. деф.—CH ₃	Третичнобутильная группа	—	Отсутствует в КР
1400	ИК	Асимм. валент.—S(=O)=O	ROSO ₂ Cl	—	—
1400—1340	ИК	Деф.—O—H	Спирты и т. д.	—	Увеличивается при образовании водородной связи
1400—1300	ИК	Валент. C=S	—	—	—

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1390	КР	Колебания NO ₃ ⁻	Ион нитрата	—	—
1385—1375	ИК	Симм. деф.—CH ₃	Гемдиметильная группа	—	Отсутствует слабая в КР
1385—1380	ИК	Симм. деф.—CH ₃	Изопропильная группа	—	Отсутствует слабая в КР
1385—1375	ИК	Симм. деф.—CH ₃	Метиллированные производные бензола	10—20	—
1380	КР	Асимм. валент.—S(=O)=O	ROSO ₂ OR'	—	—
1380—1378	ИК	Симм. деф.—CH ₃	Алифатические углеводороды с линейными цепями	5 на каждую группу CH ₂	Отсутствует слабая в КР
1380—1350	ИК	Колебания NO ₃ ⁻	Ион нитрата	—	—
1372—1366	ИК	Симм. деф.—CH ₃	Гемдиметильная или третичнобутильная группа	—	—
1370	КР	Симм. валент.—N—N(=O)=O	Алкилнитрамыны	—	—
1362—1360	ИК	Симм. деф.—CH ₃ (?)	Карбометоксиэфиры —CO—CH ₃	—	—
1360—1355	ИК	Симм. деф.—CH ₃	Углеводороды с разветвленной цепью	Очень слабая	—
1360—1330	КР, ИК	Деф. C—H	Метилазид	Слабая	—
1350	ИК	$\text{—N}=\text{N}=\text{N}^+$	Алкил- и арилнитро- соединения	Сильная	—
1350	ИК	Симм. валент.—C—N(=O)=O	N,N-дизамещенные сульфамиды	—	—
1350—1330	ИК	Валент.—C—N—	ArNHR	—	—

Частота, см^{-1}	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1350—1200	ИК	Валент. $\text{CF}_2\text{—CF}_3$	Насыщенные фторуглеводороды	—	—
1350—1150	ИК, КР	Вещные и крутильные CH_2	Полиметиленовые цепи	Полоса крутильных колебаний слабая или отсутствует в ИК	Образование прогрессии в спектре в твердом состоянии
1348—1177	КР	Симм. валент. $\text{N}=\text{N}=\text{N}^+$	Метилазид	Слабая	—
1340—1310	ИК, КР	Симм. валент. $\text{—N—N}=\text{O}$	Алкилнитрамини	—	—
1335—1310	ИК	Асимм. валент. $\text{—S}=\text{O}$	Алкилсульфоны	250—600	—
1331	КР	NO_2^-	Ион нитрита	—	—
1320	ИК	NO_2^-	Ион нитрита	—	—
1315—1162	ИК	—N—N=O	Алкилнитрозоамины	Сильная в КР, слабая в ИК	—
1306—1303	ИК, КР	Вещные CH_2	Углеводороды с неразветвленными цепями	—	—
1300	ИК	—	Димеры карбоновых кислот	—	—
1300—1250	ИК	Валент. P=O	Фосфорные оксикислоты и их эфиры	—	—
1285—1260	ИК, КР	Симм. валент. $\text{—O—N}=\text{O}$	Алкилнитраты	Сильная в КР	—
1280—1270	ИК	Симм. валент. $\text{—N—N}=\text{O}$	Алкилнитроамины	Сильная	—
1280—1230	ИК	Валент. —C—N—	AgNHR	—	—
1280—1150	ИК	Асимм. валент. —C—O—C—	Сложные эфиры, лактоны и т. д.	500—1200	Слабая в КР

Частота, см^{-1}	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1277	ИК	Валент. —C—F	CF_4	—	—
1275—1200	КР, ИК	Асимм. валент. —C—O—C—	Группа $\text{—C}=\text{C—O—C}$ в эфирах и т. д.	Сильная	—
1270	КР	Асимм. валент. $\text{—S}=\text{O}$	RSO_2R	—	—
1268	ИК, КР	Симм. колебания кольца —Si—CH_3	Окись этилена	Сильная в КР	—
1265—1258	ИК	Обертон деф. $\text{—C}\equiv\text{C—H}$	Силаны и т. д.	Сильная	—
1260	ИК	Маятниковые колебания группы CH_3 ?	Третичнобутильная группа	—	—
1250	ИК, КР	Валент. —C—N—	ArNR_1R_2	Сильная в КР	Полоса также при 1210—1200
1250—1180	ИК	Валент. —C—N—	Ароматические эфиры	—	—
1250—1175	ИК	—P=O	Фосфорных оксикислот	Сильная	—
1240	КР	NO_2^-	Ион нитрита	—	—
1240—1190	ИК	Валент. —P—O—C—	Ароматические эфиры	—	—
1230	КР	Валент. —S=O	Фосфорных оксикислот	—	—
1230—1130	ИК	Валент. —C—N—	ClSOCl	—	—
1220	ИК	NO_2^-	$(\text{RCH}_2)_3\text{N}$	—	—
1216	КР	Валент. —S=O	Ион нитрита	—	—
1210—1200	ИК, КР	Маятниковые колебания метильной группы (?)	ClSOOR	—	—
1205—1125	ИК, КР	Валент. —C—OH	Третичнобутильная группа	—	Полоса также при 1250
			Насыщенные алифатические третичные спирты, высокосимметричные вторичные спирты	Сильная	—
1200	КР	Валент. —S=O	ROSOOR	—	—
1200	ИК	—	Алкилкетоны	—	—
1200—1160	ИК	—	Сульфонаты и сульфаты	—	—

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1200—1100	ИК	Валент.—C—N—	RR'CHNH ₂ RR'CHNHCHR'' —P—OC ₂ H ₅	—	—
1200—1100	ИК	Валент.—C—N—		—	—
1190	ИК	Валент.—P—O—		—	—
1190	КР	Симм. валент.—S=O	ROSO ₂ Cl	—	—
1190	КР	Симм. валент.—S=O	ROSO ₂ OR	—	—
1190—1158	ИК	Скелетные валент.	Кетали и ацетали	—	—
1186	КР	Симм. валент. 	ClSO ₂ Cl	—	—
1186	КР	Колебания кольца	Производные циклопропана	—	—
1180—1160	ИК	—	N,N-Дизамещенные сульфамиды	—	—
1175	ИК, КР	Асимм. колебания кольца	1,3,5-Триоксан	Сильная в ИК	—
1170	ИК, КР	Маятниковые колебания метильной группы (?)	Изопропильная группа	—	—
1163—1156	ИК	Валент.—P—O—	—P—OCH ₃	—	—
1160—1130	ИК	Симм. валент. 	Алкилсульфоны	500—900	—
1155—1135	ИК	Маятниковые колебания метильной группы (?)	3-Метилпарафины	—	Дублет
1150—1080	ИК	Валент.—C—N—	RCH ₂ NHCH ₂ R'	—	—
1150—1070	ИК	Асимм. валент.—C—O—C—	Алифатические эфиры	Сильная	—
1143—1124	ИК	Скелетные валент.	Кетали и ацетали	—	—
1141—1132	ИК	Маятниковые колебания метильной группы (?)	Алифатические углеводороды с неразветвленной цепью	4—5	—

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1130	КР	Симм. валент. 	RSO ₂ R	—	—
1130—1120	ИК, КР	Симм. валент.—C=C=O	Кетен и его алкилпроизводные (RCH ₂) ₃ N	Сильная	—
1130—1030	ИК	Валент.—C—N—	1,4-Дюксан	—	—
1125	ИК, КР	Асимм. колебания кольца	α-Ненасыщенные или циклические третичные спирты, насыщенные вторичные спирты	Сильная	—
1125—1085	ИК, КР	Валент.—C—OH	Диметилловый эфир (пар)	—	—
1122	ИК	Асимм. валент.—C—O—C—	RCH ₂ NH ₂	—	—
1120—1030	ИК	Валент.—C—N—	Ацетали	—	Нет в спектре кеталей
1116—1105	ИК	Скелетные валент.	Силоксаны	—	—
1100—1000	ИК	Валент. Si—O	Органические и неорганические перхлораты	—	—
1100—1050	ИК	ClO ₄ ⁻	Тетрагидрофуран	—	—
1098—1075	ИК	Асимм. колебания кольца	Кетали и ацетали	Сильная	—
1098—1063	ИК	Скелетные валент.	Тетрагидропиран	—	—
1097	ИК	Асимм. колебания кольца	α-Ненасыщенные, вторичные спирты, N-алкилпервичные спирты, ациклические вторичные карбинолы с пяти- или шестичленными циклами	Сильная	—
1085—1050	ИК, КР	Валент.—C—OH	Группа C=C—O—C— в виниловых и ароматических эфирах	—	—
1075—1020	ИК, КР	Симм. валент.—C—O—C—	Аллен и его алкилпроизводные	Сильная в ИК и КР	—
1070	ИК, КР	Симм. валент.—C=C=C—			

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
1060—1045 1056—1038 1050	ИК ИК ИК, КР	Валент.—S=O Скелет. валент. Валент.—C—OH	Алкилсульфоокиси Кетали и ацетали Диенасыщенные вто- ричные спирты, развет- вленные и (или) ненасы- щенные грегичные спир- ты	300 — Сильная	— — —
1050—1035 1050—1030	ИК ИК	Валент.—P—O—C— —N=N—	Эпокси Алкилэфир фосфор- ных оксикислот	— Очень сильная	— —
1046	ИК, КР	—N=N—	Ароматические азосо- единения RSOR	Слабая в ИК	—
1030 1028	КР КР, ИК	Валент.—S=O	Окись триметилена	— Сильная в КР	— —
1025—1017	ИК	Симм. колебание кольца	Алкилциклопропаны	—	—
1000—950	ИК	Колебания кольца	Алкилциклобутаны	—	—
996	ИК	Деф.—C—D	Тетрадейтерометан	—	—
990	ИК	Неплоские деф.—C—H в —C=C—H	RCH=CH ₂	30—50	Также при 910
980—971 980—965	ИК, КР ИК	Асимм. колебания кольца Неплоские деф.—C—H в —C=C—H	Окись триметилена RHC=CHR' (<i>транс</i>)	Сильная в ИК 100	— —
980—930	ИК	ClO ₃ ⁻	Ион хлората	Сильная	—
970	КР	Колебания кольца	Циклобутан	—	—
958	ИК, КР	Симм. колебания кольца	1, 3, 5-Триоксан	Сильная в КР	—
940	ИК	Симм. валент. C—O—C	Диметилловый эфир (пар)	—	—
935	ИК	Неплоские деф.—O—H	Димеры карбоновых кислот	Слабая	—
930	ИК, КР	Валент. C—C (?)	Третичнобутильная группа	Сильная в КР, слабая в ИК	—
930—910	ИК, КР	ClO ₃ ⁻	Ион хлората	Слабая	—

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
918	КР	Симм. валент. C—O—C	Диметилловый эфир (пар)	—	—
917	ИК	—	Производные жирных кислот с положением эпоксигруппы на краю цепи	—	Также при 840
913 910 910	ИК, КР ИК ИК	Симм. колебания кольца Колебания кольца Неплоские деф.—C—H в —C=C—H	Тетрагидрофуран Алкилциклобутаны RHC=CH ₂	Сильная в КР — 100—150	— — Также при 990
893 890 890	ИК КР ИК	— Колебания кольца Неплоские деф.—C—H в —C=C—H	Эпокси (<i>транс</i>) Циклопентан R'RC=CH ₂	— — 100—150	— — —
885—870	ИК	Деф. C—H	1, 2, 4-Тризамещенные производные бензола	20	Также при 825—805
880	ИК, КР	Валент.—C—N—	Алифатические нитро- соединения	—	—
877	ИК, КР	Валент.—O—O—	H ₂ O ₂ , органические пе- рекиси	Сильная в КР, слабая в ИК	Не у всех перекисей
870	ИК	Деф. C—H	Пентазамещенные про- изводные бензола	—	—
870—855	ИК	Деф. C—H	1, 2, 4, 5-Тетразамещен- ные производные бензола	—	—
860—715 856—840 850—840	ИК ИК ИК	Валент.—Si—C— Асимм. колебания кольца Деф. C—H	Силаны Окись этилена 1, 2, 3, 5-Тетразамещен- ные производные бензола	— Сильная в ИК	— — —
850—830	ИК	Деф. C—H	1, 3, 5-Тризамещен- ные производные бензола	—	—
849	ИК	Валент.—C—N—	Ароматические нитро- соединения	—	—
844	ИК	Валент.—N—O	Метилнитрит (<i>цис</i>), пар	—	—

Продолжение табл.

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесенные колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
840	ИК	—	Производные жирных кислот с положением эпоксигруппы на краю цепи	—	Также при 917
840—815	ИК	NO ₃ ⁻	Ион нитрата	Сильная	—
840—810	ИК	Неплоские деф. C—H в—C=C—H	R'RC=CHR''	—	—
840—800	ИК	Деф. C—H	Тризамещенная двойная связь в шестичленном цикле	—	Две полосы
838	ИК	Плоские деф.—S—H	Тиоуксусная кислота	—	—
835—795	ИК, КР	Валент. C—C (?)	Изопропиловая и третинобутильная группа	Сильная в КР, слабая в ИК	—
833	ИК	—	Эпоксид (цис)	—	—
833—810	ИК	Деф. C—H	1,4-Дизамещенные производные бензола	—	—
832	КР	Плоские деф.—S—H	Этилмеркаптан	—	—
825—805	ИК	Деф. C—H	1, 2, 4-Тризамещенные производные бензола	100	—
822	КР	Колебания кольца	Циклогексан (форма ванны)	—	—
814	ИК	Валент.—N—O	Метилнитрит (транс), пар	—	—
813	КР	NO ₂ ⁻	Ион нитрита	—	—
813	ИК, КР	Симм. колебания кольца	Тетрагидропиран	Сильная в КР	—
810—800	ИК, КР	Деф. C—H	1, 2, 3, 4-Тетразамещенные производные бензола	—	—
810—790	ИК	BrO ₃ ⁻	Ион бромата	—	—
802	КР	Колебания кольца	Циклогексан (форма кресла)	—	—
802—790	ИК	Валент.—O—N=O	RCH ₂ —O—N=O (транс)	—	Пар

Продолжение табл.

Частота, см ⁻¹	Тип спектра	Отнесенные колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
800—770	ИК	Деф. C—H	1,3-Дизамещенные производные бензола	—	Также при 710—690. Отсутствует в КР
800—650	ИК	Деф. C—H	Дизамещенная двойная связь в шестичленном кольце	50—150	—
785—730	ИК	IO ₃ ⁻	Ион иодата	—	—
783—775	ИК	Валент.—O—N=O	RR'NC—O—N=O (транс)	—	Пар
780—760	ИК	Деф. C—H	1, 2, 3-Тризамещенные производные бензола	—	Также при 745—705 Отсутствует в КР
780—710	ИК	>CCl ₂ —CCl ₃	Насыщенные соединения	—	—
773	ИК	Валент. C—Cl	CCl ₄	—	—
764—751	ИК	Валент.—O—N=O	RR'R''C—O—N=O	—	Пар
760—740	ИК	Деф. C—H	1, 2-Дизамещенные производные бензола	100—500	Отсутствует в КР
751	ИК	Валент.—P=S	Тиофосфонилхлорид	—	—
750	ИК	NO ₂ ⁻	Ион нитрита	—	—
750—650	ИК	Валент.—P—C—	—	—	—
750—600	ИК	Валент.—C—S—C—	Диалкилсульфиды	—	Также при 701—694; отсутствует в КР
747—737	ИК	Деф. C—H	Монозамещенные производные бензола	100—300	Отсутствует в КР
745—705	ИК	Деф. C—H	1, 2, 3-Тризамещенные производные бензола	—	Также при 780—760; отсутствует в КР
742—716	КР	Деф. C—H	1, 2, 4-Тризамещенные производные бензола	—	Отсутствует в ИК
736—711	КР	Деф. C—H	1, 2-Дизамещенные производные бензола	—	Отсутствует в ИК
733	КР	Колебания кольца	Циклопентан	—	—
725—675	ИК	Неплоские деф. C—H в—C=C—H	RHC=CHR' (цис)	—	—

Продолжение табл.

Частота, с.м ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
721—711	КР	Деф. С—Н	1, 3-Дизамещенные производные бензола —(СН ₂) _n (n>4)	—	Отсутствует в ИК
720	ИК	Маятниковые СН ₂		Три на каждую группу СН ₂	Дублет в спектре (твердое состояние). Частота растет при n<5
712	ИК	Валент. С—Cl	СНCl ₃	—	—
710—690	ИК	Деф. С—Н	1, 3-Дизамещенные производные бензола	100	Также при 800—770; отсутствует в КР
705—685	ИК, КР	Валент.—С—S—	СН ₃ —S—	—	—
703	КР	Колебания кольца	Циклооктан	—	Также при 747—737; отсутствует в КР
701—694	ИК	Деф. С—Н	Монозамещенные производные бензола	100—200	Также при 850—830; отсутствует в КР
700—680	ИК	Деф. С—Н	1, 3, 5-Тризамещенные производные бензола	100	—
700—650	ИК	Валент. Р=S (P)	Органические тиофосфаты	—	—
700—600	ИК, КР	Валент. С—S—Н	Меркаптаны	Сильная в КР, слабая в ИК	—
700—600	ИК	—	Комплексы металлов с ацетилацетоном	—	—
689—680	ИК	Деф. О—N=O	СН ₂ —O—N=O (цис)	—	Пар
682—678	ИК	Деф. О—N=O	RR'CH—O—N=O	—	Пар
680	ИК	Деф. О—N=O	RR'R''C—O—N=O	—	Пар
680—600	ИК	СВг ₂ —СВг ₃	Насыщенные соединения	—	—

Продолжение табл.

Частота, с.м ⁻¹	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
675	ИК	Неплоские деф. О—D	R—COOD (лимер)	—	—
671	ИК	Деф. С—Н	Бензол	500	Отсутствует в КР
669	ИК	Валент. С—Br	СВг ₄	—	—
660—630	ИК, КР	Валент.—C—S—	RCH ₂ —S—	—	—
656	ИК	Валент. С—Cl	СН ₃ С ₂ Н ₅ Cl	—	—
652—651	КР	Деф. С—Н	1, 2, 3-Тризамещенные производные бензола	—	Отсутствует в ИК
650—600	ИК, КР	Деф.—C≡C—H	Монозамещенные производные ацетилена	Сильная	Обертон при 1260
650—250	ИК	—	Производные бензола	—	Характеристичны для замещающих групп
630—600	ИК, КР	Валент.—C—S—	RR'HC—S—	—	—
628—620	ИК	ClO ₄ ⁻	Неорганические и органические перхлораты	—	Пар
625—581	ИК	Деф.—O—N=O	RH ₂ C—O—N=O	—	—
621—613	ИК	Деф.—O—N=O	RR'R''C—O—N=O (транс)	—	—
620	КР	Деф. С—Н	Монозамещенные производные бензола	—	Пар
617	ИК	Деф.—O—N=O	(СН ₃) ₂ НС—Cl	—	Отсутствует в ИК
615	ИК	Валент. С—Cl	Алифатические нитро-соединения	—	—
610	ИК, КР	Деф.—C—NO ₂	Эфиры азотной кислоты	—	—
610—560	КР	Деф.—O—NO ₂	RR'HC—O—N=O	Сильная	—
605—594	ИК	Деф.—O—N=O	RR'R''C—S—	—	Пар
600—570	ИК, КР	Валент.—C—S—	СН ₃ —Br	—	—
594	ИК	Валент. С—Br		—	—

Частота, см^{-1}	Тип спектра	Отнесение колебания	Тип соединения	Интенсивность	Примечание
580	ИК, КР	—	$\text{RHC}=\text{CHR}'$ (цис)	—	В КР также 413 и 297
570	ИК	Валент. C—Cl	$(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{Cl}$	—	—
570—554	КР	Деф. C—H	1, 3, 5-Тризамещенные производные бензола	—	Отсутствует в ИК
565	ИК	—O—N=O	$\text{RCH}=\text{CH}_2$	—	Пар
550	ИК	—	Алкилсульфиды	—	—
550—450	ИК, КР	Валент.—S—S—	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{Br}$	—	—
536	ИК	Валент. C—Br	CH_3-I	—	—
522	ИК	Валент. C—I	$(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{Br}$	—	—
514	ИК	Валент. C—Br	$\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{I}$	—	—
500	ИК	Валент. C—I	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}-\text{I}$	—	—
495	ИК	Валент. C—I	$(\text{CH}_3)_3\text{C}-\text{I}$	—	—
490	ИК	Валент. C—I	$\text{RHC}=\text{CHR}'$ (транс)	—	—
490	ИК	—	Арилсульфиды	—	Также при 210
490—430	КР	Валент.—S—S—	$\text{RHC}=\text{CHR}'$ (транс)	Слабая	—
435	КР	—	$\text{RHC}=\text{CH}_2$	—	Также при 394, 261
434	КР	Деф. C—C	$\text{RR}'\text{C}=\text{CH}_2$	—	Частота уменьшается с удлинением цепи
334—234	КР	Неплоские деф.—S—H	n-Парафиновые цепи	—	—
332	КР	Деф. C—Cl	Меркаптан	—	—
319	ИК	Деф. C—Br	CCl_4	—	—
183	ИК	—	CBr_4	—	—

асимм. — антисимметричные
валент. — валентные
вод. — водородная
деф. — деформационные
кол. — колебания

насыщ. — насыщенные
непред. — неопределенные
оч. с. — очень сильная полоса
пер. — переменная интенсивность
р-р — раствор

с. — сильная полоса
симм. — симметричные
сл. — слабая полоса
сопр. — сопряженные
ср. — средней интенсивности

II. ТАБЛИЦЫ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ЧАСТОТ ПОГЛОЩЕНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ГРУПП АТОМОВ

В таблицах приводятся значения частот групповых колебаний в см^{-1} и в микронах. Интенсивности полос оцениваются качественно. Там, где это возможно, приводятся значения кажущегося молярного коэффициента поглощения:

$$\epsilon^a = \frac{D}{cd}$$

Таблица 1

Алканы

Группа	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность (ϵ^a)	Примечание
$-\text{CH}_3$	2975—2950 2885—2860	3,36—3,39 3,47—3,50	с. (70) с. (30)	ν_{asCH_3} ν_{sCH_3} ; в $-\text{OCH}_3$ 2830—2815 ($\epsilon^a=35-75$); в $\text{N}-\text{CH}_3$ 2820—2730 ($\epsilon^a=15-21$)
$\text{C}(\text{CH}_3)_2$	1470—1435 1385—1370 1385—1370 1370—1365	6,80—6,97 7,22—7,30 7,22—7,30 7,30—7,33	ср. (<15) с. (15) с. } с. }	δ_{asCH_3} δ_{sCH_3} Дублет примерно одинаковой интенсивности
$\text{C}(\text{CH}_3)_3$	1175—1165 1170—1140 840—790 1395—1385 1365	8,51—8,58 8,55—8,77 11,90—12,66 7,17—7,22 7,33	с. (15) с. ср. ср. } с. }	Скелетные колебания То же
$-\text{CH}_2-$	1255—1245 1250—1200 2940—2915 2870—2845	7,97—8,03 8,00—8,33 3,40—3,45 3,49—3,52	с. с. с. (75) с. (45)	Скелетные колебания То же ν_{asCH_2} ν_{sCH_2}
$-\text{CH}_2-$ в циклопропане	1480—1440 3080—3040 1020—1000 750—720	6,76—6,94 3,25—3,29 9,80—10,00 13,33—13,89	ср. (8) ср. ср. (20—80) с.	CH_2 ножничное ν_{asCH_2} Скелетное $(\text{CH}_2)_n$ маятниковое.
$-\text{CH}-$	1350—1180	7,40—8,48	сл.	В твердом состоянии иногда дублет. Имеется при $n \geq 4$. Соединения с длинными цепями и полярными группами на конце (амиды, кислоты, эфиры) имеют характерную картину полос в твердом состоянии
$-\text{CH}-$	2900—2880 1340	3,45—3,47 7,46	сл. сл.	ν_{CH} } практически не δ_{CH} } используются

Таблица 2

Алкены				
	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
а) Колебания CH				
CHR=CH ₂	3095—3010	3,29—3,32	ср. (30)	$\nu_{\text{ас}} \text{CH}_2$
	2975	3,37	ср.	$\nu_{\text{с}} \text{CH}_2$
	3040—3010	3,29—3,32	ср.	ν_{CH}
	1850—1800	5,41—5,56	ср. (30)	Обертон
	1420—1410	7,04—7,09	ср. (10—20)	δ_{CH_2} плоские
RR'C=CH ₂	1300—1290	7,69—7,75	пер.	δ_{CH} плоские
	995—985	10,05—10,15	с. (50)	δ_{CH} неплоские
	915—905	10,93—11,05	с. (110)	δ_{CH_2} неплоские
	3095—3075	3,23—3,25	ср.	ν_{CH_2}
	1800—1780	5,56—5,62	ср. (30)	Обертон
CHR=CHR' (цис)	1420—1410	7,04—7,09	ср. (10—20)	δ_{CH_2} плоские
	895—885	11,17—11,30	с. (100—150)	δ_{CH_2} неплоские
	3040—3010	3,29—3,32	ср.	ν_{CH}
	1420—1400	7,04—7,14	ср. (10—20)	δ_{CH} плоские
	730—665	13,70—15,04	ср. (40)	δ_{CH} неплоские
CHR=CHR' (транс)	3040—3010	3,29—3,32	ср.	ν_{CH}
	1310—1290	7,63—7,75	сл.	δ_{CH} плоские
	980—960	10,20—10,42	с. (100)	δ_{CH} неплоские
CRR'=CHR''	3040—3010	3,29—3,32	ср.	ν_{CH}
	850—790	11,76—12,66	с. (40)	δ_{CH} неплоские

б) Колебания C=C

C=C несопряж.	1680—1620	5,95—6,17	пер.	
CHR=CH ₂	1645—1640	6,08—6,10	ср. (40)	
CRR'=CH ₂	1660—1640	6,02—6,10	ср. (35)	
CHR=CHR' цис	1665—1635	6,01—6,12	ср. (10)	
CHR=CHR' транс	1675—1665	5,97—6,00	сл. (2)	
CRR'=CHR''	1675—1665	5,97—6,00	пер.	
CRR'=CR''R'''	1690—1670	5,92—5,99	сл.	
Диены	1650	6,06		
	1600	6,25		
Полиены	1650—1580	6,06—6,33		Широкая полоса
C=C сопряженная с фенилом	~1625	~6,16	с.	Повышенная интенсивность
C=C сопряженная с C=O	1660—1580	6,02—6,33	с.	Повышенная интенсивность

Таблица 3

Алкины и аллены				
	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
RC≡CH	3310—3300	3,02—3,03	с. (100)	ν_{CH}
	2140—2100	4,67—4,76	сл. (5)	$\nu_{\text{C}\equiv\text{C}}$
	700—600	14,29—16,67		δ_{CH}
RC≡CR'	2260—2190	4,43—4,57	сл. (1)	$\nu_{\text{C}\equiv\text{C}}$; не проявляется при высокой симметрии
C=C=C	1970—1950	5,08—5,13	ср.	Ацетиленовые соединения имеют также полосы при 1750 и 1300—1200 см^{-1}
				Расщепляется при концевом положении и при присоединении к электроноакцепторным группам
	1060 850	9,43 11,76	ср. ср.	δ_{CH} ; появляется только при концевом положении

Таблица 4

Ароматические соединения				
	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание

а) Колебания ароматического кольца

1625—1575	6,16—6,35	пер.	Обычно ближе к 1600
1525—1475	6,56—6,78	пер.	Обычно ближе к 1500
1590—1575	6,29—6,36	пер.	Для сопряженных систем полоса интенсивна
1465—1440	6,38—6,94	пер.	

б) Валентные колебания CH

3080—3030	3,25—3,30	ср. (<60)	Обычно несколько полос
-----------	-----------	-----------	------------------------

Продолжение табл. 4

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
в) Плоские деформационные колебания СН				
Монозамещенные	1175—1125	8,51—8,89	сл.	Отсутствует у 1, 3, 5-замещенных
1,3-, 1,2,3- и	1110—1070	9,01—9,35	сл.	
1,3, 5-замещенные	1070—1000	9,35—10,00	сл.	
1,2-, 1,4- и 1,2,4-замещенные	1225—1175 1125—1090 1070—1000	8,17—8,51 8,89—9,17 9,35—10,00	сл. сл. сл.	Две полосы
1,2-, 1,2,3- и 1,2,4-замещенные	1000—960	10,00—10,42	сл.	

г) Неплоские деформационные колебания СН

Монозамещенные	770—730	12,99—13,70	с.	
	710—690	14,08—14,49	с.	
1,2-замещенные	770—735	12,99—13,61	с.	
1,3-замещенные	900—860	11,11—11,63	ср.	
	810—750	12,35—13,33	с.	
	725—680	13,74—14,71	ср.	
1,4- и 1,2,3,4-замещенные	860—800	11,63—12,50	с.	
1,2,3-замещенные	800—770	12,50—12,99	с.	
	720—685	13,89—14,60	ср.	
1,2,4-замещенные	860—800	11,63—12,50	с.	
	900—860	11,11—11,63	ср.	
1,3,5-замещенные	900—860	11,11—11,63	ср.	
	865—810	11,56—12,35	с.	
	730—675	13,70—14,81	с.	
1,2,3,5-1,2,4,5-и 1,2,3,4,5-замещенные	900—860	11,11—11,63	ср.	

Примечание. В области 2000—1600 см^{-1} все ароматические соединения имеют группу слабых полос (обертон и составные частоты), число и положение которых определяется характером замещения в бензольном кольце (см. рис. I.17).

Таблица 5

Спирты и фенолы

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
а) Валентные колебания ОН				
Свободная группа ОН	3670—3580	2,73—2,79	пер. (30—100)	Узкая полоса
Межмолекулярная водородная связь:				

Продолжение табл. 5

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
димеры	3550—3450	2,82—2,90	гер.	Узкая полоса. Интенсивность уменьшается с разведением растворов
полиассоциаты	3400—3200	2,94—3,13	с.	Широкая полоса. Интенсивность уменьшается с разбавлением растворов
Внутримолекулярная водородная связь	3590—3420	2,79—2,92	пер. (50—100)	Узкая полоса. Не меняет интенсивность при разбавлении растворов
Хелаты	3200—2500	3,13—4,00	сл.	Очень широкая. Не меняет интенсивность при разбавлении растворов

б) Колебания, связанные с группой С—О—Н

Первичные спирты	1075—1000	9,30—10,00	с. (60—200)	Широкая
	1350—1260	7,40—7,94	с.	
Вторичные спирты	1125—1030	8,93—9,71	с.	
	1350—1260	7,41—7,94	с.	
Третичные спирты	1170—1100	8,55—9,09	с.	
	1410—1310	7,09—7,63	с.	
Фенолы	1230—1140	8,13—8,77	с.	»
	1410—1310	7,09—7,63	с.	

Таблица 6

Простые эфиры

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
Алифатические:				
а) —C—O—C—	1150—1060	8,70—9,43	с. (>200)	
б) C—C—O	920—800	10,87—12,50	с. (>200)	
Ароматические винильные =C—O—C	1270—1230 1075—1020	7,87—8,13 9,30—9,80	с. (>200) с.	

Продолжение табл.

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
Циклические эфиры:				
а) эпоксисоединения	1260—1240 950—860	7,94—8,07 10,53—11,63	с. (>200) пер.	Для транс-соединений
	865—750	11,56—13,32	ср.	Для цис-соединений
б) эфиры с большими циклами	1140—1070	8,77—9,35	с. (>200)	
Кетали, ацетали	1200—1040	8,34—9,62		Группа из 4 или 5 полос
С—О—С—О—С				
Перекиси:				
а) алифатические	890—830	11,24—12,05	оч. сл.	
б) ароматические	~1000	~10	сл.	
Дополнительные полосы метоксигруппы				
Alk—OCH ₃	2830—2815	3,53—3,55	ср. (50)	$\nu_{\text{сн}_3}$
Ar—OCH ₃	~2850	~3,51	ср.	$\nu_{\text{сн}_3}$

Таблица 7

Кетоны

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
а) Колебания карбонильной группы				
Алифатические				
—H ₂ C—CO—CH ₂ —	1725—1700	5,80—5,88	с. (300—600)	
α -, β -Непредельные				
C=C—CO	1695—1660	5,90—6,02	с.	Интенсивность полосы C=C в области 1650—1600 см^{-1} повышена
α -, β -, α' -, β' -Непредельные C=C—CO—C=C	1670—1660	5,99—6,02	с.	
Циклогептаноны	1715—1700	5,83—5,88	с.	
Циклогексаноны	1720—1700	5,81—5,88	с.	
Циклопентаноны	1750—1740	5,71—5,75	с.	
Циклобутаноны	1780—1760	5,62—5,68	с.	
Арилалкилкетоны	1700—1680	5,88—5,95	с.	
Диарилкетоны	1670—1660	5,99—6,02	с.	
α -Галогенозамещенные CX—CO	1745—1725	5,72—5,80	с.	
α -, α' -Дигалогенозамещенные CX—CO—CX	1765—1745	5,67—5,72	с.	
α -Дикетоны —CO—CO	1730—1710	5,78—5,85	с.	В циклических кетонах только экваториальный галоген вызывает такие смещения

Продолжение табл. 7

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
β -Дикетоны				
CO—CH ₂ —CO:				
а) енольная форма	1640—1535	6,10—6,52	с.	Имеется широкая полоса $\nu_{\text{он}}$ в области 3200—2700 см^{-1} Иногда дублет
б) кетонная форма	~1720	~5,81	с.	
—CO—C=C—OH (или NH ₂)	1640—1535	6,10—6,52	с.	Имеется полоса связанных $\nu_{\text{он}}$ или ν_{NH}
—CO—C=C—OR	~1640	~6,10	с.	
—CO—C ₆ H ₄ —OH (орто) (или NH ₂)	1655—1610	6,04—6,21	с.	Имеется полоса $\nu_{\text{он}}$ или ν_{NH_2} с водородной связью
—CO—CH ₂ —CH ₂ —CO	1725—1705	5,80—5,87	с.	
—CO—CH ₂ —O—CO—	1745—1725	5,73—5,80	с.	
Хиноны:				
а) две группы CO в одном и том же цикле	1690—1655	5,92—6,04	с.	
б) две группы CO в разных циклах	1655—1635	6,04—6,12	с.	
Трополон	1620—1600	6,17—6,25	с.	
б) Другие колебания				
CH ₃ CO	1360—1355	7,35—7,38	с.	δ_{CH_3}
—CH ₂ —CO	1435—1405	6,97—7,12	с.	δ_{CH_2}
Диалкилкетоны	1325—1215	7,55—8,23	ср.	
Арилалкилкетоны	1225—1075	8,17—9,30	ср.	
C=O	3550—3200	2,82—3,13	сл.	Обертон $\nu_{\text{с=о}}$

Таблица 8

Альдегиды

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
а) Колебания карбонильной группы				
Предельные алифатические —CH ₂ —CHO	1740—1720	5,75—5,81	с.	
α -, β -непредельные C=C—CHO	1705—1685	5,78—5,93	с.	
Сопряженные полиеновые C=C—C=C—CHO	1680—1660	5,95—6,02	с.	

Продолжение табл. 8

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
Ароматические ArCHO $-\text{C}(\text{OH})=\text{C}-\text{CHO}$	1715—1695 1670—1645	5,83—5,90 5,99—6,08	с. с.	Имеется полоса ν_{OH} с внутримолекулярной водородной связью
б) Другие колебания				
CHO	2880—2650	3,47—3,77	сл. или ср.	Могут быть две полосы: ν_{CH} и обертон или составная частота δ_{CH}
Алифатические альдегиды	975—780 1440—1325	10,26—12,82 6,94—7,55	сл. ср.	
Ароматические альдегиды	1415—1350 1320—1260 1230—1160	7,07—7,41 7,58—7,94 8,13—8,62	ср. ср. ср.	

Таблица 9

Карбоновые кислоты

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
--	-----------------------	----------------------	----------------------------	------------

а) Колебания карбонильной группы

Предельные алифатические кислоты $-\text{CH}_2-\text{COOH}$: мономер	~1760	~5,68	с. (~1500)	
димер α, β -Непредельные кислоты $\text{C}=\text{C}-\text{COOH}$: мономер	1725—1700	5,80—5,88	с.	
димер	~1720	~5,81	с.	
Ароматические кислоты ArCOOH : мономер	1715—1680	5,83—5,95	с.	
димер	~1720	~5,81	с.	
Кислоты с внутримолекулярной водородной связью	1700—1680 1680—1650	5,88—5,95 5,95—6,06	с. с.	
α -Галоген кислоты $-\text{CHX}-\text{COOH}$	1740—1715	5,75—5,83	с.	

Продолжение табл. 9

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
б) Колебания OH -группы				
Свободная группа OH	3550—3500	2,82—2,86	ср.	ν_{OH}
Связанная группа OH	3300—2500	3,00—4,00	сл.	Широкая полоса, может быть группа полос
Любая группа OH	955—890	10,47—11,24	пер.	Широкая полоса неплоскостных деформационных колебаний OH
в) Другие колебания				
Твердые жирные кислоты $-\text{COOH}$	1350—1180	7,40—8,48	сл.	Колебания CH_2 . Группа полос. Число полос дает сведения о длине углеродной цепи
	1440—1395 1320—1210	6,94—7,17 7,58—8,26	сл. } с. }	Составные частоты
г) Соли кислот				
$-\text{COO}-$	1610—1550 1420—1300	6,21—6,45 7,04—7,69	с. ср.	Асимм. валент. кол. Симм. валент. кол.

Таблица 10

Сложные эфиры и лактоны

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
а) Колебания карбонильной группы				
Предельные алифатические эфиры $-\text{CH}_2-\text{COOR}$	1750—1735	5,71—5,76	с. (500—1000)	
α, β -Непредельные $\text{C}=\text{C}-\text{COO}-$	1730—1715	5,78—5,83	с.	
Ароматические $\text{Ar}-\text{COO}-$	1730—1715	5,78—5,83	с.	
Виниловые эфиры и эфиры фенолов $-\text{COO}-\text{C}=\text{C}-$ и $-\text{COO}-\text{Ar}$	1800—1770	5,56—5,65	с.	Имеется сильная полоса $\nu_{\text{C}=\text{C}}$ при 1690—1650 см^{-1}

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
α -Кетозфиры и α -дизфиры	1755—1740	5,70—5,75	с.	
β -Кетозфиры: кетонная форма	~1735	~5,76	с.	β -Кетонная $\nu_{\text{C=O}}$ при ~1750 см^{-1}
енольная форма	1655—1635	6,04—6,12	с.	Широкая, очень сильная полоса C=C при 1630 см^{-1}
γ - и последующие кетозфиры и дизфиры	1750—1735	5,71—5,76	с.	
o -Окси или o -аминоароматические сложные эфиры	1690—1670	5,92—5,99	с.	Имеется полоса хелатной OH (или NH_2)
β -Лактоны	~1825	~5,48	с.	
γ -Лактоны, насыщенные	1780—1760	5,62—5,68	с.	
γ -Лактоны, α, β -непредельные	1760—1740	5,68—5,75	с.	Полоса может быть расщеплена
γ -Лактоны, β, γ -непредельные	1805—1785	5,54—5,60	с.	
δ -Лактоны, насыщенные	1750—1735	5,71—5,76	с.	
δ -Лактоны, α, β -непредельные	~1720	~5,81	с.	
δ -Лактоны, γ, δ -непредельные	~1760	~5,68	с.	
α -Галоген				Во всех типах эфиров происходит повышение частоты карбонильной группы на 10—40 см^{-1}

б) Колебания с участием связи C—O

Формиаты HCOOR	1200—1180	8,33—8,48	с.	
Ацетаты CH_3COOR	1250—1230	8,00—8,13	с.	
Ацетаты фенолов и виниловых спиртов	1220—1200	8,20—8,33	с.	
Пропионаты и высшие эфиры	1200—1170	8,33—8,55	с.	
Эфиры:				
α, β -непредельных алифатических кислот	1310—1250	7,63—8,00	с.	
ароматических кислот	1180—1130	8,48—8,85	с.	
	1300—1250	7,69—8,00	с.	
	1150—1100	8,70—9,09	с.	

Ангидриды кислот, галогенангидриды кислот, перекиси

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
а) Колебания карбонильной группы				
Ангидриды ациклические насыщенные	1840—1800	5,44—5,56	с.	
Ангидриды ациклические сопряженные	1780—1740	5,62—5,75	с.	
Ангидриды с пятичленным циклом насыщенные	1820—1780	5,50—5,62	с.	
Ангидриды с пятичленным циклом сопряженные	1760—1720	5,68—5,81	с.	
Ангидриды с шестичленным циклом насыщенные	1870—1830	5,35—5,46	с.	
Ангидриды с шестичленным циклом сопряженные	1800—1760	5,56—5,68	с.	
Ангидриды с шестичленным циклом насыщенные	1850—1810	5,41—5,53	с.	
Ангидриды с шестичленным циклом сопряженные	1795—1740	5,57—5,75	с.	
Ангидриды с шестичленным циклом α, β -ненасыщенные	~1800	~5,56	с.	$\Delta \nu = 50-70 \text{ см}^{-1}$ $\Delta \nu = 45 \text{ см}^{-1}$ при эндодвойной связи и $\Delta \nu = 75 \text{ см}^{-1}$ при экзодвойной связи
	~1750	~5,71	с.	
	~1780	~5,62	с.	
	~1735	~5,77	с.	
Галогенангидриды насыщенных кислот	1815—1785	5,51—5,60	с.	
Галогенангидриды ненасыщенных кислот	1800—1770	5,56—5,65	с.	
Перекиси жирного ряда R—CO—O—O—CO—R	1820—1810	5,50—5,53	с.	
Перекиси ароматического ряда ArCOOOCOAr	1800—1780	5,56—5,62	с.	
	1805—1780	5,54—5,62	с.	
	1785—1755	5,60—5,70	с.	
б) Другие колебания				
Ангидриды ациклические	1175—1045	8,51—9,57	с.	
Ангидриды циклические	1310—1210	7,63—8,26	с.	
Перекиси	890—830	11,24—12,05	сл.	

Амиды кислот

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
а) Валентные колебания NH				
Первичные амиды свободная группа NH_2	3540—3480	2,83—2,88	с.	
связанная группа NH_2	3420—3380	2,92—2,96	с.	
	3360—3320	2,97—3,01	ср.	
	3220—3180	3,11—3,15	ср.	
Вторичные амиды свободная группа NH (цис)	3440—3420	2,91—2,93	с.	

Продолжение табл. 12

	ν , см^{-1}	λ , $\mu\text{м}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
свободная NH (транс)	3450—3440	2,89—2,91	с.	
связанная NH (цис)	3180—3140	3,15—3,19	ср.	
связанная NH (транс)	3330—3270	3,00—3,06	ср.	
связанная NH (цис и транс)	3100—3070	3,23—3,26	сл.	

б) Полоса «Амид I» (полоса поглощения C=O)

Первичные амиды: твердые	~1650	~6,06	с.	Для разбавленных растворов
разбавленные растворы	~1690	~5,92	с.	
Вторичные амиды: твердые	1680—1630	5,95—6,14	с.	
разбавленные растворы	1700—1665	5,88—6,01	с.	
Третичные амиды: (твердые и разбавленные растворы)	1670—1630	5,99—6,14	с.	
β -Лактамы моноциклические	1760—1730	5,68—5,78	с.	
β -Лактамы циклические конденсированные	1780—1770	5,62—5,65	с.	
γ -Лактамы моноциклические	~1700	~5,88	с.	
γ -Лактамы циклические конденсированные	1750—1700	5,71—5,88	с.	
Лактамы с большими циклами	~1680	~5,95	с.	
Производные мочевины:				Для разбавленных растворов
—NH—CO—NH—	1660	6,02	с.	
—CO—NH—CO	1790—1720	5,59—5,81	с.	
	1710—1670	5,85—5,99	с.	
уретаны	1735—1700	5,76—5,88	с.	
карбаматы	1710—1690	5,85—5,92	с.	

в) Полоса «Амид II» (составные частоты деформационных колебаний NH и колебаний C—N)

Первичные амиды: твердые	1650—1620	6,06—6,17	с.	
разбавленные растворы	1620—1590	6,17—6,31	с.	

Продолжение табл. 12

	ν , см^{-1}	λ , $\mu\text{м}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
Вторичные нециклические амиды: твердые	1570—1515	6,37—6,60	с.	
разбавленные растворы	1550—1510	6,45—6,62	с.	

г) Другие полосы

Первичные амиды	1420—1400	7,04—7,14	ср.	Полоса «Амид III»
Вторичные амиды	1305—1200	7,67—8,33	ср.	
	770—620	13,00—16,13	ср.	
	630—530	15,87—18,87	с.	

Таблица 13

Амины, имины и их соли

	ν , см^{-1}	λ , $\mu\text{м}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
--	--------------------------	---------------------------	----------------------------	------------

а) Валентные колебания NH

Первичные амины	3500—3300	2,86—3,03	сл. в RNH_2 $\epsilon^a \sim 30$	Две полосы $\nu_{\text{ас}}$ и $\nu_{\text{сNH}_2}$
Вторичные амины	3500—3300	2,86—3,03	сл. в ArNH_2 в RNHR ; $\epsilon^a =$ $= 30—40$ в ArNHR	Одна полоса
Имины C=NH	3400—3200	2,94—3,13	гер.	Одна полоса. Имеется $\nu_{\text{C=N}}$ при 1690—1640 см^{-1}
Ассоциированная группа NH	3400—3100	2,94—3,23	ср.	

б) Деформационные колебания NH

Первичные амины	1650—1580	6,06—6,33	ср. с.	Плоские деформационные колебания. Широкая полоса. Неплоские деформационные колебания
	900—650	11,2—15,4	ср.	
Вторичные амины	1650—1550	6,06—6,45	сл.	
Ассоциированные NH				Полосы деформационных колебаний смещаются к более высоким частотам

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
--	-----------------------	----------------------	----------------------------	------------

в) Другие колебания

Алифатические амины	1220—1020	8,20—9,80	сл. ср.	ν_{CN}
Ароматические амины:				
первичные	1340—1250	7,46—8,00	с.	
вторичные	1350—1280	7,41—7,81	с.	
третичные CH_3N	1360—1310	7,35—7,63	с.	
	2820—2760	3,55—3,62	пер.	

г) Соли аминов

$+\text{—NH}_3^+$				
твердые	3350—3150	2,99—3,18	ср.	Валент. NH_3^+ широкая полоса
растворы	~3380	~2,96	ср.	Валент. NH_3^+
	~3280	~3,05	ср.	
	~1600	~6,25	ср.	Асимм. деф. NH_3^+
	~1300	~7,69	ср.	Симм. деф. NH_3^+
	~800	~12,50	сл.	маятниковые NH_3^+
$-\text{NH}_2^+$	2700—2250	3,70—4,44	с.	Валент. NH_2^+ широкая полоса или группа узких полос
	1620—1560	6,17—6,41	ср.	Деф. NH_2^+
	~800	~12,50	сл.	Маятниковые NH_2^+
$-\text{NH}$	2700—2250	3,70—4,44	ср.	Широкая полоса или группа узких полос
$\text{C}=\text{NH}^+$	2500—2325	4,00—4,30	с.	Широкая полоса или группа узких полос
	2200—1800	4,55—5,56	ср.	Одна или несколько полос
	~1680	~5,95	ср.	$\nu_{\text{C}=\text{N}^+}$
$\text{C} \begin{smallmatrix} \diagup \\ \diagdown \end{smallmatrix} \text{N}^+ \begin{smallmatrix} \diagdown \\ \diagup \end{smallmatrix} \text{C}$				Не имеет характеристических полос

Аминокислоты, амидокислоты

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
--	-----------------------	----------------------	----------------------------	------------

а) Аминокислоты

Аминокислоты, держащие NH_2	3130—3030	3,20—3,30	ср.	Валент. NH_3^+
	1660—1610	6,02—6,21	сл.	Деф. NH_3^+
				Аминокислотная полоса I
	1550—1485	6,45—6,73	ср.	Деф. NH_3^+
				Аминокислотная полоса II
Дикарбоновые α -аминокислоты	1755—1720	5,70—5,81	с.	Колебания $\text{C}=\text{O}$ не-ионизованного карбоксила
Другие дикарбоновые аминокислоты	1730—1700	5,78—5,88	с.	
Дикарбоновые аминокислоты	1230—1215	8,13—8,23	с.	Колебания с участием связи $\text{C}—\text{O}$
Все аминокислоты	1600—1560	6,25—6,41	с.	Колебания ионного карбоксила
	2760—2530	3,62—3,95	сл.	
	2140—2080	4,67—4,81	сл.	
	1335—1300	7,49—7,70	ср.	

б) Соли аминокислот $\text{H}_2\text{N}-(\text{CH}_2)_n-\text{CO}_2^-\text{M}^+$

NH_2	3400—3200	2,94—3,13	с.	ν_{NH_2} 2 полосы
CO_2^-	1600—1560	6,25—6,41	с.	

в) Хлористоводородные соли аминокислот $\text{H}_3\text{N}^+-(\text{CH}_2)_n-\text{CO}_2\text{HCl}^-$

H_3N^+	3130—3030	3,20—3,30	ср.	Валент. NH_3^+
	1610—1590	6,21—6,29	сл.	Деф. NH_3^+
	1550—1485	6,45—6,73	пер.	Деф. NH_3^+
	1755—1730	5,70—5,78	с.	Валент. $\text{C}=\text{O}$
Хлористоводородные соли α -аминокислот	1730—1700	5,78—5,88	с.	Валент. $\text{C}=\text{O}$
Хлористоводородные соли других аминокислот	3030—2500	3,30—4,00	сл.	Ряд почти неразрешающихся полос
Все хлористоводородные соли аминокислот	~2000	~5,00	сл.	
	1335—1300	7,49—7,70	ср.	Колебания с участием $\text{C}—\text{O}$
	1230—1215	8,13—8,23	с.	

Продолжение табл. 14

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
г) Амидокислоты				
NH	3390—3260	2,95—3,07	ср.	Валент. NH
α -амидокислоты	1725—1695	5,80—5,90	с.	Колебания C=O
	1620—1600	6,14—6,25	с.	Полоса «Амид I»
Другие амидокислоты	1650—1620	6,06—6,14	с.	Полоса «Амид I»
Все амидокислоты	1570—1500	6,37—6,67	с.	Полоса «Амид II»
	1230—1215	8,13—8,23	с.	Колебание с участием CO
	2640—2360	3,79—4,24	сл. }	Иногда не проявляются
	1945—1835	5,14—5,45	сл. }	

Таблица 15
Непредельные азотсодержащие соединения

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
а) C=N				
C=N в открытой цепи	1690—1635	5,92—6,12	пер.}	Различные оксазолы, оксимы, оксазины, оксазолины, азометины и др.
α, β -непредельные C=N в открытой цепи	1665—1630	6,01—6,14	пер.}	
α, β -непредельные; C=N в цикле	1660—1480	6,02—6,76	пер.	
б) C≡N				
Предельные нитрилы	2260—2240	4,43—4,46	сл. ср. (10—150)	
α, β -Непредельные ациклические нитрилы	2235—2215	4,47—4,52	с.	
Арилнитрилы	2240—2220	4,46—4,51	ср. с.	
Изонитрилы	2185—2120	4,58—4,72	с.	

в) Соединения типа A=B=N

N=C=N	2155—2130	4,64—4,70	с. (1300—1700)	Карбодинимиды
N=C=O	2275—2240	4,40—4,46	с. (1300—2000)	Изоцианаты

г) —N=N—

Азосоединения	1600—1400	6,25—7,15	пер.	
---------------	-----------	-----------	------	--

Продолжение табл. 15

	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
д) N $\equiv$ N				
Азиды—N ₃	2160—2120	4,63—4,72	с.	
Соли диазония—N ₂	1350—1180	7,41—8,48	сл.	
	2300—2230	4,35—4,49	с.	

Гетероциклические соединения

Таблица 16

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
Фураны 	3165—3125 ~1565 ~1500	3,16—3,20 ~6,39 ~6,67		ν_{CH} Колебания кольца
(бензофураны имеют аналогичные полосы поглощения)	1030—1015 885—870	9,70—9,85 11,3—11,5	с.	Наиболее характеристична для фуранов Широкая, иногда расщеплена ν_{CH} Колебания кольца
Тиюфены 	800—740	12,5—13,5		
	3125—3050 ~1520 ~1040 750—690	3,20—3,28 ~6,58 ~9,6 13,3—14,5	с.	
Пирролы 	3440—3400	2,91—2,94	ср.	ν_{NH} в растворах
(индолы имеют аналогичные полосы поглощения)	~1565 ~1500	~6,39 ~6,67	пер. } пер. }	Колебания кольца
Пиридины и хинолины	3070—3020 ~1200 * 1100—1000* 900—670 ~710 * 1650—1580 1580—1550 1510—1480	3,26—3,31 ~8,33 * 9,09—10,00* 11,11—14,93 ~14,08 * 6,06—6,33 6,33—6,45 6,62—6,76	с. } с. } с. } с. } ср. } сл. } ср. }	Валентные и деформационные колебания CH Колебания кольца

* Только пиридины.

Продолжение табл. 16

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
Пиримидины и пурины	3060—3010 1000—960 825—775 1580—1520	3,27—3,32 10,00—10,42 12,12—12,90 6,33—6,58	с. ср. ср. ср.	Валентные и деформационные колебания СН Колебания кольца

Таблица 17

Соединения, содержащие ковалентные азот-кислородные связи

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
------------	-----------------------	----------------------	----------------------------	------------

а) Нитросоединения $\text{R}-\text{NO}_2$

Нитропарафины	920—830	10,88—12,05	пер.	
Первичные и вторичные нитросоединения	1565—1545 1385—1360 1380	6,39—6,47 7,22—7,35 7,25	с. с. ср.	ν_{asNO_2} ν_{sNO_2} Деф. CH_2
Третичные нитросоединения	1545—1530 1360—1340	6,47—6,54 7,35—7,46	с. с.	в $-\text{CH}_2-\text{NO}_2$ ν_{asNO_2} ν_{sNO_2}
α, β -Непредельные нитросоединения	1530—1510 1360—1335	6,54—6,62 7,35—7,49	с. с.	ν_{asNO_2} ν_{sNO_2}
α -Галоиднитросоединения	1580—1570 1355—1340	6,33—6,37 7,38—7,46	с. с.	ν_{asNO_2} ν_{sNO_2}
α, α -Дигалоиднитросоединения	1600—1575 1340—1325	6,25—6,35 7,46—7,55	с. с.	ν_{asNO_2} ν_{sNO_2}
Ароматические нитросоединения	1550—1510 1365—1335 860—840 ~750	6,45—6,62 7,33—7,49 11,68—11,90 ~13,33	с. с. с. с.	ν_{asNO_2} ν_{sNO_2}

б) Нитраты $\text{R}-\text{O}-\text{NO}_2$

Колебания NO_2	1655—1610 1300—1255	6,04—6,21 7,69—7,97	с. с.	ν_{asNO_2} ν_{sNO_2}
Другие колебания	870—690	11,5—14,5	пер.	

Продолжение табл. 17

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
------------	-----------------------	----------------------	----------------------------	------------

в) Нитрамыны $\text{R}-\text{N}-\text{NO}_2$

Предельные нитрамыны	1585—1530	6,31—6,54	с.	ν_{asNO_2}
Алкилнитрогуанидины	1640—1605	6,10—6,23	с.	ν_{asNO_2}
Арилнитрогуанидины и нитроуреаты	1590—1575	6,29—6,35	с.	ν_{asNO_2}
Все нитрамыны	1300—1260 790—770	7,69—7,94 12,66—12,99	с. ср.	ν_{sNO_2}

г) Нитрозосоединения $\text{R}-\text{C}-\text{N}=\text{O}$

$\text{C}-\text{N}=\text{O}$	1600—1500	6,25—6,67	с.	ν_{NO}
Ароматические	~1500	~6,67	с.	ν_{NO}
трет-Алифатические	~1550	~6,45	с.	ν_{NO}
α -Галогензамещенные алифатические	1620—1560	6,17—6,41	с.	ν_{NO}

д) Нитриты $\text{RO}-\text{N}=\text{O}$

$\text{R}-\text{O}-\text{N}=\text{O}$	1680—1630	5,95—6,06	оч. с.	$\nu_{\text{N}=\text{O}}$
транс-Форма	815—750	12,27—13,33	с.	Колебание с участием $\text{N}-\text{O}$
	625—565	16,00—17,70	с.	Деф. $\text{O}-\text{N}=\text{O}$
цис-Форма	1625—1610	6,16—6,21	оч. с.	ν_{NO}
	850—810	11,76—12,35	с.	Колебание с участием $\text{N}-\text{O}$
Все нитриты	690—615 3360—3220	14,49—16,26 2,98—3,11	с. ср.	Деф. $\text{O}-\text{N}=\text{O}$ Обертоны $\nu_{\text{N}=\text{O}}$

е) Нитрозамины $\text{R}_2\text{N}-\text{N}=\text{O}$

$\text{N}-\text{N}=\text{O}$	1500—1480	6,67—6,76	с.	$\nu_{\text{N}=\text{O}}$ для твердых образцов
	1460—1440	6,85—6,94	с.	$\nu_{\text{N}=\text{O}}$ для разбавленных растворов
	~1050 ~660	~9,52 ~15,15	с. с.	

ж) Окиси аминов $\text{R}_3\text{C}-\text{N}\rightarrow\text{O}$

N-Окиси алифатических аминов	970—950	10,31—10,53	с.	$\nu_{\text{N}\rightarrow\text{O}}$
N-Окиси пиридинов и пиримидинов	1300—1250	7,69—8,00	пер.	$\nu_{\text{N}\rightarrow\text{O}}$
Азоксисоединения $\text{R}-\text{N}=\text{N}\rightarrow\text{O}$	1310—1250	7,63—8,00	с.	$\nu_{\text{N}\rightarrow\text{O}}$

Серусодержащие органические соединения Таблица 18

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
------------	-----------------------	----------------------	----------------------------	------------

а) Колебания с участием связи C—S

	705—570	14,18—17,54	сл.	
--	---------	-------------	-----	--

б) Валентные колебания C=S

>C=S	1200—1050	8,33—9,52	с.	
Тиоуреаты				
—N—CS—N	1430—1130	6,99—8,85	с.	
Тиоамиды				
NH—CS	1550—1460	6,45—6,85	с.	
(RS) ₂ C=S	1300—1100	7,69—9,09	с.	
(RO) ₂ C=S	1060—1050	9,43—9,52	с.	
—C=C—C=S	1235—1210	8,10—8,26	с.	
Ar ₂ C=S	1155—1140	8,66—8,77	с.	
	1230—1215	8,13—8,23	с.	

в) Валентные колебания S—H

	2590—2550	3,86—3,92	сл.	
--	-----------	-----------	-----	--

г) Валентные колебания S=O

Предельные или не- предельные сульфокислоты	1070—1030	9,35—9,71	с. (300)	Для твердых образцов на 10—20 см^{-1} ниже
Сульфиновокислоты R—SO ₂ H	~1090	~9,17	с.	
Эфиры сульфонов R—SO ₂ R	1140—1125	8,77—8,89	с.	
Сульфиты (RO) ₂ SO	1220—1170	8,20—8,55	с.	
Сульфоны предельные и непредельные	1350—1300	7,41—7,69	оч. с.	
R ₂ SO ₂	1160—1120	8,62—8,93	(250—600) оч. с. (500—900)	Для твердых образцов на 10—25 см^{-1} ниже, часто расщепляются
Сульфонаты	1420—1330	7,04—7,52	с.	ν_{asSO_2}
R—O—SO ₂ —R	1200—1145	8,33—8,73	с.	ν_{ssO_2}
Сульфаты (RO) ₂ SO ₂	1440—1350	6,94—7,41	с.	ν_{asSO_2}
	1230—1150	8,13—8,70	с.	ν_{ssO_2}
Сульфокислоты	1260—1150	7,94—8,70	с.	ν_{asSO_2}
RSO ₃ H	1080—1010	9,26—9,90	с.	ν_{ssO_2}
	700—600	14,29—16,67	с.	В солях поглощение такое же
Сульфохлориды	1375—1340	7,27—7,46	с.	ν_{asSO_2}
RSO ₂ Cl	1190—1160	8,40—8,62	с.	ν_{ssO_2}

Продолжение табл. 18

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
Сульфамиды	1370—1300	7,30—7,69	с.	ν_{asSO_2}
RSO ₂ N<	1180—1140	8,48—8,77	с.	ν_{ssSO_2}

Таблица 19

Галогенопроизводные органических соединений

Соединения	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
------------	-----------------------	----------------------	----------------------------	------------

а) Колебания C—X

C—F монофторзамещенные	1110—1000	9,01—10,00	с.	
C—F дифторзамещенные	1250—1050	8,00—9,50	оч. с.	Две полосы
C—F полизамещенные	1400—1100	7,14—9,10	оч. с.	Много полос
CF ₃ —CF ₂ —	1365—1325	7,33—7,55	с.	
C—Cl, монохлорзамещенные	750—700 ~650	13,33—14,30 ~15,40	с.	
C—Cl, экваториальная	780—750	12,80—13,33	с.	
C—Cl, аксиальная	730—580	13,70—17,25	с.	
C—Cl, полизамещенные	800—700 ~650 ~560	12,50—14,30 ~15,40 ~17,85	оч. с. с. с.	
C—Br, экваториальная	750—700	13,33—14,29	с.	
C—Br, аксиальная	690—550	14,50—18,20	с.	
C—I	600—500	16,67—20,00	с.	

б) Другие колебания

CF ₃ —Ar	1330—1310 1185—1170 1150—1130	7,52—7,62 8,44—8,55 8,70—8,85	с. с. с.	
CF ₃ —CF ₂	745—730	13,42—13,70	с.	

Таблица 20

Фосфорорганические соединения

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
P—H	2440—2350	4,10—4,26	ср.	Узкая полоса
P—C ₆ H ₅	1450—1435	6,90—6,97	ср.	Надежных данных нет
P—Alk				Асимм. деф. CH ₃
P—CH ₃	1320—1280	7,58—7,81	ср.	$\nu_{\text{P=O}}$
P=O (свободная)	1350—1175	7,41—8,51	с.	$\nu_{\text{P=O}}$
P=O (при водородной связи)	1250—1150	8,00—8,70	оч. с.	
P—O—Ar	1240—1180	8,07—8,48	с.	
P—O—Alk	1050—990	9,52—10,10	оч. с.	
P—O—CH ₃	1190—1170	8,40—8,55	сл.	
P—O—C ₂ H ₅	1170—1140	8,55—8,77	сл.	
P—O—H	2700—2560	3,70—3,90	сл.	ν_{OH} ; при водородных связях широкая
P=S	840—600	11,90—16,67	сл.	
P—Cl	580—440	17,25—22,73	с.	
P—F	900—800	11,11—12,50	с.	
Фосфаты: алкилзамещенные	1180—1150 ~1080	8,48—8,70 ~9,26	с.	
арилзамещенные	1090—1040	9,17—9,62	с.	

Таблица 21

Кремнийорганические соединения

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
Si—H	2280—2080	4,39—4,81	оч. с.	
Si—CH ₃	1260 ~800	7,94 ~12,50	оч. с.	Деф. CH ₃
Si(CH ₃) ₂	1260	7,94	оч. с.	Деф. CH ₃
Si(CH ₃) ₃	815—800 1250 840 755	12,27—12,50 8,00 11,90 13,25	оч. с. оч. с. оч. с. оч. с.	Деф. CH ₃
Si—Ar	1430—1425 1135—1090	6,99—7,02 8,81—9,17	оч. с. оч. с.	
Si—O—Si и Si—O—C	1090—1020	9,17—9,80	оч. с.	Вал. Si—O

Таблица 22

Соединения бора

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
B—CH ₃	1460—1405 1320—1280	6,85—7,12 7,58—7,81		
B—Ar	1440—1430	6,94—6,99	с.	
B...H—B	2000—1600	5,00—6,25	пер.	Может быть несколько полос
BH ₂	1205—1140 975—945 ~2200	8,30—8,77 10,26—10,58 ~4,50		ν_{BH} , дублет
B—H	2220—1600	4,51—6,25		Несколько полос
B—O	1350—1310	7,41—7,63	с.	
BN	1380—1330	7,25—7,52	с.	
B—Cl	910—890	10,99—11,24	с.	

Таблица 23

Неорганические ионы и молекулы

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
AsO ₄ ³⁻	~800	~12,50	с.	
AsF ₆ ⁻	705—690	14,18—14,49	оч. с.	
BH ₄ ⁻	2400—2200 1130—1040	4,17—4,55 8,85—9,62	с. с.	Одна или несколько полос
BF ₄ ⁻	~1060 ~1030	~9,43 ~9,71	оч. с. оч. с.	
BrO ₃ ⁻	810—790	12,35—12,66	оч. с.	
CO ₃ ²⁻	1450—1410 880—800	6,90—7,09 11,36—12,50	оч. с. ср.	
HCO ₃ ⁻	1420—1400 1000—990 840—830 705—695	7,04—7,14 10,0—10,10 11,90—12,05 14,18—14,39	с. с. с. с.	
ClO ₃ ⁻	980—930	10,20—10,75	оч. с.	
ClO ₄ ⁻	1140—1060	8,77—9,43	оч. с.	Широкая полоса
CrO ₄ ²⁻	950—800	10,53—12,50	с.	Несколько полос
Cr ₂ O ₇ ²⁻	950—900	10,53—11,11	с.	

Соединение	$\nu, \text{см}^{-1}$	$\lambda, \text{мк}$	Интенсивность ϵ^a	Примечание
CN ⁻ , CNO ⁻ , CNS ⁻	2200—2000	4,55—5,00	с.	Нормальные карбонилы
CO	2100—2000	4,76—5,00	с.	
	~1830	~5,46	с.	
HF ₂ ⁻	~1450	~6,90	с.	Мостиковые карбонилы
	~1230	~8,13	с.	
IO ₃ ⁻	800—700	12,50—14,29	с.	
MnO ₄ ⁻	920—890	10,87—11,24	оч. с.	Несколько полос
	850—840	11,76—11,90	ср.	
NH ₄ ⁺	3335—3030	3,00—3,30	оч. с.	
	1485—1390	6,73—7,19	с.	У комплексных нитритов две полосы
N ₃ ⁻	2170—2080	4,61—4,81	с.	
	1375—1175	7,27—8,51	сл.	
NO ₂ ⁻	1400—1300	7,14—7,69	с.	У комплексных нитритов две полосы
	1250—1230	8,00—8,13	оч. с.	
	840—800	11,90—12,50	сл.	
NO ₃ ⁻	1410—1340	7,09—7,46	оч. с.	
	860—800	11,63—12,50	ср.	
	1410—1370	7,09—7,30	с.	
NO ₂ ⁺	2370—2230	4,22—4,48	с.	координационные соединения
NO ⁺	1940—1630	5,16—6,14	с.	
NO ⁺ (координационные соединения)	1170—1045	8,55—9,57	с.	
NO ⁻ (координационные соединения)	1850—1790	5,41—5,59	с.	нитрозилгалогениды
NO (нитрозилгалогениды)	850—840	11,76—11,90	оч. с.	
PF ₆ ⁻	1100—950	9,09—10,53	с.	
PO ₄ ²⁻ HPO ₄ ²⁻	1660—1620	6,02—6,17	сл.	
H ₂ PO ₄ ⁻	1000—990	10,00—10,10	с.	
S ₂ O ₃ ²⁻	1130—1080	8,85—9,26	оч. с.	
SO ₄ ²⁻	680—610	14,71—16,40	ср.	
HSO ₄ ⁻	1180—1160	8,84—8,62	с.	
	1080—1000	9,26—10,00	с.	
SO ₃ ²⁻	880—840	11,36—11,90	с.	
	~1100	~9,09	пер.	
SeO ₄ ²⁻	~830	~12,05	с.	
SiF ₆ ²⁻	~725	~13,79	с.	Все силикаты
UO ₂ ²⁺	1100—900	9,09—11,11	с.	
	940—900	10,64—11,11	с.	

III. КОНСТАНТЫ ЭКРАНИРОВАНИЯ ДЛЯ ПРОИЗВОДНЫХ МЕТАНА

Заместитель	$\sigma_{\text{эфф}}$	Заместитель	$\sigma_{\text{эфф}}$
Cl	2,53	CH ₃	0,47
Br	2,33	C=C	1,32
I	1,82	C≡C	1,44
NR ₂	1,57	C ₆ H ₅	1,65
OH	2,56	CF ₃	1,14
OR	2,56	C≡N	1,70
OC ₆ H ₅	3,23	COR	1,70
O		COOR	1,50
		CONR ₂	1,59
OCR	3,13		
SR	1,64		

IV. ТАБЛИЦЫ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ПРОТОНОВ

I. Химические сдвиги монозамещенных метильной, метиленовой и метиновой групп, δ , м. д.

R	CH ₃ —R	—CH ₂ —R	>CH—R
$\begin{array}{c} \diagup \\ -C- \\ \diagdown \end{array}$	0,8—1,4	1,25—1	1,5—1,6

а) Алкильные группы, отделенные от функциональной группы одним атомом углерода

—C—N	0,9—1,1	1,2—1,6	
—C—N—COR	1,2		
—C—CO—R	0,9—1,1	1,6—1,9	
—C—CO—OR (или NR ₂)	1,1—1,2	1,9—2,3	
—C—COCl	1,7		
—C—C=C	1,3	1,2—1,6	
—C—Ar	1,1—1,5	1,6—1,8	
—C—OR	1,1—1,3	1,2—1,8	2,0
—C—O—COR и	1,1—1,3	1,5	
—C—O—Ar			
—C—Cl	1,4—1,6	1,6—2,0	1,4—1,6
—C—Br	1,6—1,8	1,7—2,0	1,7—1,8
—C—I	1,9—2,0	1,7—1,9	1,4—1,6
—C—SO ₂ R	1,6	2,2	
—C—NO ₂	1,6	2,1	

б) Алкильные группы, присоединенные к функциональной группе

—Si	0	1	
—C=C—	1,5—2,1	1,8—2,3	2,8
—C≡C—COR	1,9—2,1	2,4	
—C=C—OR		2,9	

R	CH ₃ -R	-CH ₂ -R	>CH-R
-C=C (или CN) COOR	1,9-2,0	2,4	
-C=C OCOR	1,9		
-C=C C=C	1,8		
-Ar	2,1-2,5	2,5-3,0	2,7-2,9
-C≡N	2,0		
-C=NOH	1,8		
-COR (альдегиды, кетоны, кислоты, амиды и эфиры кислот)	1,9-2,2	2,0-2,4	2,5-2,7
-COCl (или Br)	2,7-2,8		
-CO-C=C или -CO-Ar	1,8-2,7		
-COSR	2,3-2,5		
-S-R	2,1	2,4	
-N<	2,1-2,3	2,3-3,2	2,7-2,9
-N-COR			
-N-SO ₂ R	2,8-3,1	3,2-3,4	
-N-Ar			
-N ⁺	3,3	3,4	
-N-N-	2,3		
-OH	3,4	3,6	3,8
-OR	3,2-3,6	3,3-3,6	3,5-4,1
-O-CO-R	3,6-4,0	3,9-4,3	4,8-5,1
-OAr			
-OB(OR) ₂	3,3		
-Cl	3,1	3,3-3,6	3,9-4,1
-Br	2,6	3,2-3,6	4,0-4,2
-I	2,1	3,0-3,2	4,2
-F	4,3		
-SOR	2,5		
-SO ₂ R	3,1	2,9	
-SO ₂ Cl	3,6		
-SO ₂ F	3,3	3,3	
-O-SOOR	3,6		
-O-SO ₂ OR	3,9		
-S-C≡N	2,6		
-N=C-S		3,6	
NO ₂	4,3	4,4	4,7

2. Химические сдвиги диазамещенной метиленовой группы X-CH₂-Y

Заменители	-Br	-Cl	-Ar	-NR ₂	-OH	-OR	-OAr	O -O-CR	-SR	-C≡C-	-C≡C-	-C≡N	R -C=O	OR -C=O	NR ₂ -C=O
-Br	4,1	5,2	4,4	4,1	5,1	4,9	5,8	5,7	4,2	3,9-4,4	3,8	3,7	4,3	4,1	4,2
-Cl	5,3	5,3	4,5	4,4	5,3	5,1	6,0	5,9	4,4	4,0	4,1	4,1	4,5	4,2	4,3
-Ar			3,8	3,1	4,6	4,5	5,2	5,3	3,7	3,4	3,5	3,7	3,8	3,6	3,6
-NR ₂	3,4			4,3	4,3	4,1	5,0	4,9	3,4	3,2	3,2	3,5	3,5	3,3	3,4
-OH				5,3	5,1	5,1	6,0	5,9	4,4	4,1	4,3	4,5	4,5	4,3	4,4
-OR						4,5		5,7	4,2	3,9	4,2	4,2	4,3	4,2	4,3
-OAr						5,0	5,8	6,6	5,1	4,8	4,9	5,2	5,2	5,1	5,1
							6,7	6,5	5,0	4,7	4,8	5,1	5,1	4,9	4,9
							O -OCR	-SR	3,5	3,1	3,3	3,6	3,6	3,4	3,5
									-C=C-	2,9	3,0	3,2	3,3	3,1	3,1
										-C≡C-	3,1	3,4	3,6	3,2	3,3
											-C≡N	R -C=O	3,6	3,5	3,5
													3,6	3,5	3,5
													OR -C=O	3,3	3,4
														NR ₂ -C=O	3,4
															3,4

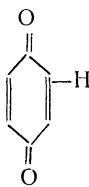
3. Химические сдвиги метиновой группы, связанной с несколькими функциональными группами

Заместители	δ , м. д.	Заместители	δ , м. д.
$-\text{C}=\text{C}-$ $-\text{C}=\text{C}-$ Ar Ar Ar Cl $\text{C}=\text{C}$ OR	3,5 4,2 6,6 4,1	$(\text{OR})_3$ Br_3 Cl_3	5,0 6,8 7,1

4. Химические сдвиги в трехчленных циклах

Цикл	δ , м. д.	Цикл	δ , м. д.
$-\text{C}-\text{C}-$ CH_2	0,2	$-\text{C}-\text{O}-$ CH_2	2,3
$-\text{N}-\text{C}-$ CH_2	1,5	$-\text{C}-\text{O}-$ CH	2,7

5. Химические сдвиги в ацетиленовых и олефиновых соединениях

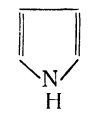
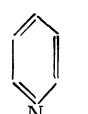
Соединение	δ , м. д.	Соединение	δ , м. д.
$-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$ $\text{H}_2\text{C}=\text{C}<$ $-\text{CH}=\text{C}<$ $-\text{C}=\text{CH}-\text{COR}$ (альдегиды, кетоны, кислоты и эфиры) $-\text{C}=\text{CH}-\text{OR}$ $-\text{CH}=\text{C}-\text{OR}$ $\text{R}-\text{CO}-\text{CH}=\text{C}-\text{COR}$	2,3—2,9 4,6 5,1 5,7—6,0 6,2 4,5—5,5 6,0—6,1	$\text{Br}-\text{CH}=\text{C}-$ $\text{CH}=\text{C}-\text{C}\equiv$ $\text{Ar}-\text{C}=\text{CH}-$ $\text{ArCH}=\text{C}-\text{Ar}$ $\text{ArCH}=\text{C}-\text{Br}$ $\text{ArC}=\text{CHBr}$ $\text{ArC}=\text{CH}-\text{COR}$ (кислоты, эфиры, альдегиды, кетоны) $\text{Ar}-\text{CH}=\text{C}-\text{CO}-\text{R}$ (кислоты, эфиры, альдегиды, кетоны)	6,6—7,0 5,7 5,3—5,4 7,0 7,1 7,6 6,3—7,0 7,4—7,7
	6,8—6,9		

6. Химические сдвиги в производных бензола

Соединение	δ , м. д.	Соединение	δ , м. д.
$\text{C}_6\text{H}_5\text{R}$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{X}^*$ $\text{C}_6\text{H}_5\text{NI}$ $\text{C}_6\text{H}_4\text{X}_2$ $\text{C}_6\text{H}_4\text{R}_2$ и полиалкилбензолы $\text{C}_6\text{H}_5\text{OR}$ $\text{C}_6\text{H}_4(\text{OR})_2$	7,1—7,3 6,5 7,2—7,4 6,6—7,1 6,8 6,7	$\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$ $\text{C}_6\text{H}_5-\text{C}=\text{C}-$ $\text{C}_6\text{H}_5-\text{C}\equiv\text{C}-$ $\text{C}_6\text{H}_5\text{CO}-\text{R}$  положение 1 положение 2	7,7 7,1—7,5 7,3 7,5 7,7 7,4

* X—галоген

7. Химические сдвиги в гетероциклах

Соединение	δ , м. д.	Соединение	δ , м. д.
 положение 2 положение 3	6,6 6,1	 положение 2 положение 3	7,4 5,7—6,3
 положение 2 положение 3	7,2 7,0	 положение 2 положение 3 положение 4	8,5 7,2 7,6

8. Химические сдвиги в альдегидах

Соединение	δ , м. д.
RCHO $-\text{C}=\text{C}-\text{CHO}$ ArCHO	9,6—9,8 9,4—9,7 9,6—10,1

9. Химические сдвиги в других функциональных группах

Соединение	δ , м. д.
ROCOH $\text{Ar}-\text{CH}=\text{N}-\text{N}-$ RNH_2 и R_2NH ROH : первичные и вторичные третичные фенолы	8,0 8,5 1,7 5,1 3,5 7,0

СОДЕРЖАНИЕ

	Стр.
Предисловие	3
Введение	6
Оптические спектры	9
Законы поглощения света	12
Способы изображения спектров поглощения	13
Связь колебательных спектров со строением органических соединений	18
Число полос в спектре	18
Характеристические частоты групп	20
Экспериментальные данные по ИК-спектрам поглощения органических соединений	23
Углеводороды	25
Органические соединения с функциональными группами	33
Органические соединения, содержащие кислород	33
Органические соединения азота	42
Органические соединения, содержащие атомы галогенов	48
Кремнийорганические соединения	49
Фосфорорганические соединения	50
Органические соединения, содержащие серу	50
Металлорганические соединения	52
О некоторых факторах, влияющих на ИК-спектры	54
Условия измерения спектров поглощения в инфракрасной области	60
Связь электронных спектров поглощения со строением органических соединений	61
Электронные спектры поглощения отдельных классов органических соединений	65
Алифатические соединения	66
Ароматические соединения	74
Гетероциклические соединения	82
Использование электронных спектров для идентификации и определения структуры органических соединений	87
Растворители, применяемые при измерении электронных спектров поглощения	94
Протонный магнитный резонанс	96
Химический сдвиг	98
Спин-спиновое взаимодействие	103
Измерение спектров протонного магнитного резонанса	109
Задачи	111
Ответы	191
Литература	213
I. Сводная таблица характеристических групповых частот	214
II. Таблицы характеристических частот поглощения различных групп атомов	235
III. Константа экранирования для производных метана	259
IV. Таблицы химических сдвигов протонов	259