

Monika Gensicka-Kowalewska, Maria J. Milewska

**Podstawy metod badań
struktury związków organicznych
w zadaniach**

Gdańsk 2024

PRZEWODNICZĄCY KOMITETU REDAKCYJNEGO
WYDAWNICTWA POLITECHNIKI GDAŃSKIEJ

Dariusz Mikielewicz

RECENZENT

Marek Gołębiowski

REDAKCJA JĘZYKOWA

Agnieszka Frankiewicz

SKŁAD I PROJEKT OKŁADKI

Wioleta Lipska-Kamińska

Wydano za zgodą
Rektora Politechniki Gdańskiej

Oferta wydawnicza Politechniki Gdańskiej jest dostępna pod adresem
<https://www.sklep.pg.edu.pl>

Utwór nie może być powielany i rozpowszechniany, w jakiegokolwiek formie
i w jakikolwiek sposób, bez pisemnej zgody wydawcy.

© Copyright by Wydawnictwo Politechniki Gdańskiej, Gdańsk 2024

ISBN 978-83-7348-906-6

Spis treści

1. Wprowadzenie	7
1.1. Ogólne zasady spektroskopii absorpcyjnej	7
1.2. Chromofory	11
1.3. Identyfikacja związków na podstawie widm	11
1.4. Zadania	12
2. Spektrometria mas	13
2.1. Procesy jonizacyjne	13
2.2. Aparatura w spektrometrii mas	14
2.3. Widma mas	15
2.3.1. Widma mas o wysokiej rozdzielczości (HR MS)	16
2.3.2. Fragmentacja molekularna	17
2.3.3. Główne drogi fragmentacji	18
2.4. Zadania	21
3. Spektroskopia w podczerwieni	26
3.1. Zakres i natura IR absorpcji	26
3.2. Rodzaje przejść	28
3.2.1. Rezonans Fermiego	28
3.3. Wpływ wiązań wodorowych na widma IR	29
3.4. Częstotliwości grupowe	29
3.5. Najważniejsze chromofory promieniowania IR	30
3.5.1. Drgania walencyjne grupy hydroksylowej OH	30
3.5.2. Drgania walencyjne grupy karbonyłowej	30
3.5.3. Inne polarne grupy funkcyjne	32
3.5.4. Chromofory absorbujące w zakresie 2600–1900 cm ⁻¹	34
3.6. Zadania	34
4. Spektroskopia elektronowa	39
4.1. Natura spektroskopii elektronowej	39
4.2. Ilościowe aspekty spektroskopii UV	40
4.3. Klasyfikacja pasm absorpcji UV	42

4.3.1. Promieniowanie w zakresie widzialnym a kolor substancji	43
4.3.2. Specjalne pojęcia używane w spektroskopii UV-VIS	43
4.4. Niektóre ważne chromofory promieniowania UV-VIS	44
4.4.1. Chromofory izolowane	44
4.4.2. Chromofory sprzężone	46
4.4.3. Związki aromatyczne	48
4.5. Efekt rozpuszczalnika	50
4.6. Zadania	50
5. Jądrowy rezonans magnetyczny	53
5.1. Równanie Larmora i jądrowy rezonans magnetyczny	53
5.2. Pomiar widma NMR	57
5.2.1. Rozpuszczalniki w spektroskopii NMR	57
5.2.2. Wzorzec w spektroskopii NMR	58
5.3. Przesunięcie chemiczne w spektroskopii ^1H NMR	58
5.3.1. Protony połączone z atomami węgla	60
5.3.2. Protony połączone z heteroatomami. Protony podlegające wymianie ..	65
5.4. Sprzężenie spinowo-spinowe jąder w ^1H NMR	67
5.4.1. Układy spinowe I rzędu	70
5.4.2. Równocенność jąder	71
5.4.3. Odczynniki przesunięcia chemicznego	75
5.5. Spektroskopia fluorowego rezonansu magnetycznego ^{19}F NMR	76
5.5.1. Stałe sprzężenia spinowego $^{19}\text{F}^{19}\text{F}$ oraz $^{19}\text{F}^1\text{H}$	77
5.5.2. Wpływ jąder ^{19}F zawartych w cząsteczce na widma NMR innych jąder	77
5.6. Spektroskopia węglowego rezonansu magnetycznego ^{13}C NMR	77
5.6.1. Wpływ struktury cząsteczki na przesunięcie chemiczne w ^{13}C NMR ...	78
5.6.2. Stałe sprzężenia spinowego w ^{13}C NMR	78
5.6.3. Techniki stosowane w spektroskopii ^{13}C NMR	79
5.7. Zadania – ^1H NMR	81
5.8. Zadania – ^{13}C NMR	87
5.9. Zadania dodatkowe	89
6. Odpowiedzi	95
Literatura	127

Jedna z autorek niniejszego skryptu przez kilka lat prowadziła zajęcia dydaktyczne z zakresu spektroskopowych metod wyznaczania struktury związków organicznych. Opracowanie zostało oparte na treściach tych wykładów oraz rozszerzone o zbiór zadań w odniesieniu do każdej omówionej spektroskopii oraz spektrometrii mas.

Skrypt jest przeznaczony dla studentów chemii, technologii chemicznej, biotechnologii i kierunków pokrewnych. Zadania zawarte w tym zbiorze mogą być wykorzystywane zarówno podczas zajęć, jak i w ramach indywidualnej pracy studentów. Odpowiedzi do niektórych zadań – oznaczonych symbolem * – zamieszczono na końcu książki.

Widma NMR są w większości widmami symulowanymi, natomiast pozostałe widma zostały zaczerpnięte z badań własnych autorek.

Dziękujemy prof. Tadeuszowi Połośkiemu za przeczytanie manuskryptu i krytyczne uwagi, za które jesteśmy niezwykle zobowiązani. Będziemy wdzięczni za wszelkie inne sugestie.

Autorki