

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Кафедра хімії та методики її навчання

Методичні рекомендації з теми:
«Інфрачервона спектроскопія»
курсу «Фізико-хімічні методи аналізу»
з використанням програми IR Tutor

Кривий Ріг

2018 рік

Методичні рекомендації з теми: «Інфрачервона спектроскопія» курсу «Фізико-хімічні методи аналізу» рекомендовано для студентів, що навчаються за ОКР "бакалавр", природничого напрямку освіти у ВНЗ, які містять теоретичні відомості з теми та розробки лабораторних робіт з використанням програми IR Tutor. Ця комп'ютерна програма призначена для навчання студентів основам інфрачервоної спектроскопії.

Розробник: студентка V курсу групи XI-м-12 Подуст С.В.

Рецензент: к.б.н., доцент кафедри хімії та методики її навчання Шенаєва Т.О.

Затверджено на засіданні кафедри хімії
та методики її навчання

4 січня 2018 року

ЗМІСТ

Вступ.....	4
Лекційне заняття №1. ІЧ-спектроскопія.....	8
Лабораторна робота № 1. Основи роботи з програмою IR Tutor та її можливості.....	18
Лабораторна робота № 2. Природа світла та теоретичні основи ІЧ спектроскопії з використанням програми Ir Tutor.....	25
Лабораторна робота № 3. Інтерпретація ІЧ-спектру органічних речовин з використанням програми IR Tutor (варіанти лабораторних робіт на вибір 1-гексен; 1-гексан).....	29
Література.....	41

Вступ

В даний час комп'ютерні технології - це технології навчання, засновані на використанні комп'ютера і програмного забезпечення, які вирішують такі дидактичні завдання, розв'язування яких без використання комп'ютера недостатньо ефективно. Крім цього, комп'ютерні технології дають можливість на якісно новому рівні вивчати різні курси хімії. Вони надають інформацію в зручній формі – у вигляді графіків, таблиць, діаграм, екранних картинок, дають можливість створювати 3D-моделі молекул та вивчати їх параметри, створювати віртуальні хімічні лабораторії або користуватись стандартними моделями віртуальних хімічних лабораторій, проводити статистичну обробку результатів хімічного аналізу.

Інфрачервона (ІЧ) спектроскопія є одним з основних методів аналізу органічних сполук. Сучасна ІЧ-спектроскопія являє собою експрес-метод встановлення структурних особливостей органічних сполук. За допомогою ІЧ-спектроскопії швидко і надійно ідентифікуються різноманітні функціональні групи: карбонільна, гідроксильна, карбоксильна, амідна, аміно-, ціано- та інші; а також різні неграничні фрагменти: подвійні і потрійні карбон-карбонів зв'язки, ароматичні або гетероароматичні системи.

Методами ІЧ-спектроскопії вивчають внутрішньо- і міжмолекулярні взаємодії, наприклад, утворення водневих зв'язків.

Зараз у світі функціонує достатньо багато сучасних програмних комплексів, що реалізують методи ІЧ-спектроскопії, однак, для широкого кола користувачів використання цих методів забезпечує відома програма IR Tutor.

Дана програма є повнофункціональною версією, яку можна скачати на сайті: <http://rutracker.org/forum/viewtopic.php?t=3360128>.

Рік/Дата Випуску: 1993

Версія: 1.0

Розробник: Charles B. Abrams

Сайт розробника: <http://www.irtutor.com/>

Сумісність з Windows 7: повна

Мова інтерфейсу: Англійська

Системні вимоги: ОС Windows, 15 МБ вільного місця на диску.

IR Tutor - це програма для навчання студентів і аспірантів основ інфрачервоної спектроскопії. Клікаючи на пік в спектрі можна побачити анімацію відповідного коливання. Опції "Розширити" і "Накладення" дозволяють самостійно навчитися розшифровувати та інтерпретувати ІЧ-спектри. У програму включені розділи "Вступ" і "Теорія", що описують природу електромагнітного спектра, гармонійних коливань і багато іншого.

Дані методичні рекомендації підготовлено в рамках дисципліни «Фізико-хімічні методи аналізу», яка викладається студентам 2-го курсу денної форми навчання природничого факультету.

Використання комп'ютерних технологій в учбовому процесі повинно стати пріоритетним не тільки при вивченні курсу «Фізико-хімічні методи аналізу», а також при організації самостійної роботи студентів.

При викладі матеріалу передбачалося, що користувач ознайомлений з основами інформатики, загальної та органічної хімії. Необхідно також відзначити, що для успішного освоєння програми користувачеві потрібні базові навички роботи на ПК в операційній системі Windows.

Мета і завдання: дані методичні рекомендації спрямовані на вироблення у студентів навичок володіння спеціалізованим хімічним програмним забезпеченням, на прикладі програми IR Tutor, і застосування його в навчальній практиці та самостійній роботі.

В результаті освоєння змістовного модуля «ІЧ-спектроскопія з використанням програми IR Tutor» дисципліни «Фізико-хімічні методи аналізу» студенти повинні **володіти професійними компетенціями:**

1. Вміти логічно, вірно, аргументовано і зрозуміло будувати усну і письмову мову.

2. Вміти працювати з комп'ютером на рівні користувача та застосовувати навички роботи з комп'ютерами як у соціальній сфері, так і в області пізнавальної і професійної діяльності.

4. Володіти основними методами, способами і засобами отримання, зберігання, обробки інформації, мати навички роботи з комп'ютером як засобом управління інформацією.

5. Розуміти сутність і соціальну значущість професії, основних перспектив і проблем, що визначають конкретну галузь діяльності.

6. Володіти основами теорії фундаментальних розділів хімії (насамперед загальної, органічної, фізичної, аналітичної хімії).

В результаті освоєння теми студенти повинні:

Знати:

- основи роботи програми IR Tutor;
- суть теорії ІЧ-спектроскопії;
- області ІЧ-спектра;
- особливості конструкції окремих блоків ІЧ-спектрофотометрів;
- методика реєстрації ІЧ-спектрів рідких, твердих та газоподібних проб.

Вміти:

- використовувати навички роботи в програмі IR Tutor;
- розпізнавати ІЧ-спектр серед інших спектрів речовин.

Форми контролю:

Контроль засвоєння змістовного модуля «ІЧ-спектроскопія з використанням програми IR Tutor» студентами здійснюється на основі рейтингової системи оцінки якості навчальної діяльності студентів і включає: контроль поточної успішності (відвідування занять і виконання лабораторних робіт) і заключний контроль у вигляді письмової роботи (самостійної або контрольної).

ТЕМИ І ЗМІСТ ЗАНЯТЬ

№		Теми занять	Кількість годин.
1	Лекція	ІЧ-спектроскопія	2
2	Лаб.роб. №1	Основи роботи з програмою IR Tutor та її можливості	2
3	Лаб.роб. №2	Природа світла та теоретичні основи ІЧ спектроскопії з використанням програми Ir Tutor	2
4	Лаб.роб. №3	«Інтерпретація ІЧ-спектру органічних речовин» з використанням програми IR Tutor. (Варіанти лабораторних робіт на вибір: «1-гексан»; «1-гексен»).	2
Всього			8

Лекція на тему: «ІЧ-спектроскопія»

План лекції:

1. Місце коливальної спектроскопії у молекулярному аналізі.
2. Основи коливальної спектроскопії. Області ІЧ-спектра.
3. Прилади та методика реєстрації ІЧ-спектрів.
4. Області використання ІЧ-спектроскопії.

1. Місце коливальної спектроскопії в молекулярному аналізі

Коливальна спектроскопія - розділ молекулярної спектроскопії, що вивчає спектри поглинання і відбивання, обумовлені квантовими переходами між коливальними рівнями енергії молекул. Діапазон частот коливальних переходів - від 3×10^{11} до 10^{14} Гц, а в $\lambda = 0,750 - 1000$ мкм (хвильове число від 10 до приблизно 40000 см^{-1}). $1 \text{ мкм} = 1000 \text{ нм}$.

Коливальні спектри можуть бути отримані або в результаті безпосереднього поглинання речовиною інфрачервоного випромінювання, або при поглинанні видимого та ультрафіолетового випромінювання, коли частина поглиненої енергії витрачається на збудження молекул, а велика частина реємується речовиною (поглинання енергії для коливального переходу).

Відповідно розрізняють такі види коливальної спектроскопії:

- інфрачервона спектроскопія;
- спектроскопія комбінаційного розсіювання (раманівська).

Вони складають основу органічного аналізу разом з ЯМР-спектроскопією, мас-спектроскопією та хроматографією.

Частоти коливальних спектрів використовуються також для розрахунку силових полей молекул, тобто, для визначення різного типу сил взаємодії атомів у молекулі. Так звані силові константи для значного числа груп атомів мають властивість перенесення, тобто, вони постійні в рядах подібних за будовою молекул.

Коливальна спектроскопія є:

- 1) молекулярно-специфічною, тобто, дозволяє одержати інформацію про функціональні групи молекул (їх типи, взаємодії і орієнтації);
- 2) селективною по відношенню до ізомерів завдяки області «відбитків пальців»;
- 3) методом якісного аналізу;
- 4) методом кількісного і недеструктивного (без руйнування зразка) аналізу, при цьому працюють з концентрацією в 0,1%-100%, крім того, визначають мікрокількості речовин після концентрування.
- 5) Визначення базується на законі Бугера-Ламберта-Бера з використанням методу калібрувального графіка та методу базової лінії.

2. Основи коливальної спектроскопії. Області ІЧ-спектра

Коливальні спектри молекул експериментально вивчаються методами інфрачервоної (ІЧ) спектроскопії та спектроскопії комбінаційного розсіювання (КР).

Ці спектри пов'язані з переходами між коливальними енергетичними рівнями молекули. В класичній інтерпретації їх пов'язують з коливаннями атомних ядер відносно рівноважних положень.

Число і положення смуг у спектрі залежать від природи та кількості атомів у молекулі, її геометричної будови, симетрії, а також від потенціального поля внутрішньомолекулярних сил.

Інтенсивності смуг визначаються електронними властивостями молекул: дипольним моментом (μ), поляризованістю (α), а також їх змінами в процесі коливань.

ІЧ-спектри

Інфрачервоне випромінювання – електромагнітне випромінювання, що займає спектральну область між червоним кінцем видимого випромінювання (з довжиною хвилі $\lambda \approx 0,74$ мкм) і короткохвильовим радіовипромінюванням ($\lambda \sim 1-2$ мм).

При проходженні ІЧ-випромінювання через речовину відбувається його поглинання на частотах, що збігаються з деякими коливальними і

обертальними частотами молекул або з частотами коливань кристалічної решітки. В результаті інтенсивність ІЧ-випромінювання на цих частотах падає – утворюються смуги поглинання (рис.1).

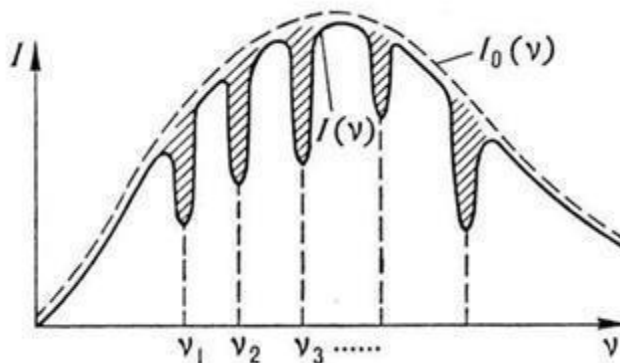


Рис.1. Залежність інтенсивності вихідного випромінювання $I_0(\nu)$ і того, що пройшло через речовину $I(\nu)$. $\nu_1, \nu_2, \nu_3, \dots$ — власні частоти речовини; заштриховані області - смуги поглинання.

Це поглинання має селективний характер і відбувається, як уже говорилося раніше, на тих частотах, які збігаються з деякими власними частотами коливань атомів в молекулах речовини і з частотами обертання молекул як цілого, а в разі кристалічної речовини — з частотами коливань кристалічної решітки.

Інфрачервоні спектри поглинання виникають в результаті переходів між коливальними рівнями молекули, які є в основному електронному стані. Коливальні спектри проявляються в ІЧ-діапазоні електромагнітного випромінювання, яку поділяють на три ділянки:

близька:	0,750 – 2,5 мкм	13000 – 4000 см^{-1}
середня (основна):	2,5 – 50 мкм	4000 – 200 см^{-1}
далека:	50 – 1000 мкм	200 – 10 см^{-1}

В **середньому** ІЧ-діапазоні розташовані довжини хвиль більшості нормальних коливань (групові частоти та «відбитки пальців»).

В **ближньому** ІЧ-діапазоні розташовані обертони нормальних коливань, які використовуються для рутинного аналізу харчових продуктів та технологічних сумішей.

В дальньому ІЧ-діапазоні розташовані частоти, які відповідають коливанням кристалічної решітки та нормальним коливанням слабких зв'язків і зв'язків з важкими атомами. В цю область ІЧ-випромінювання потрапляють практично тільки коливання зв'язків метал-карбон.

Реально чисто коливальні спектри проявляються в області від 10000-100 см^{-1} .

Молекула може поглинати квант ІЧ-випромінювання лише в тому випадку, якщо це приводить до зміни її дипольного моменту. Не можуть поглинати ІЧ спектри молекули з ковалентним зв'язком, це H_2 , N_2 , галогени, молекула CO_2 з симетрично валентними коливаннями атомів.

ІЧ-спектри здебільшого представляють в координатах $T(\%) - \nu, \text{см}^{-1}$, хвильове число зменшується зліва направо, або в координатах $T(\%) - \lambda, \text{нм}$, довжина хвилі збільшується зліва направо (рис.2).

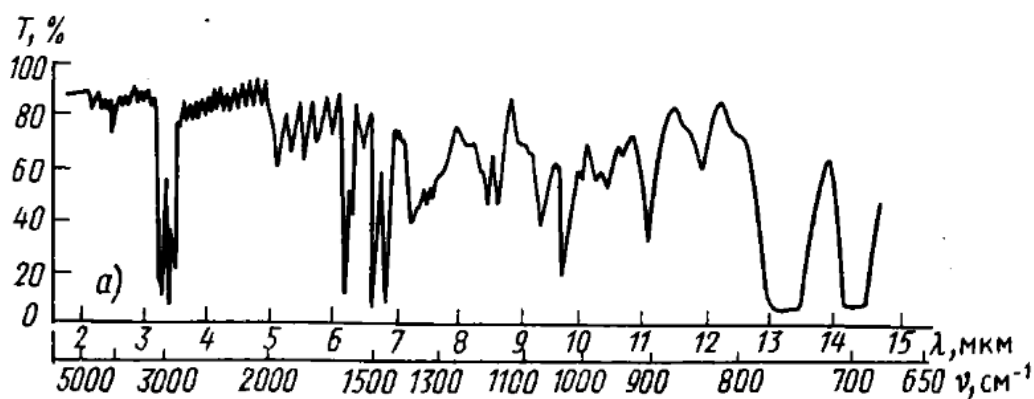
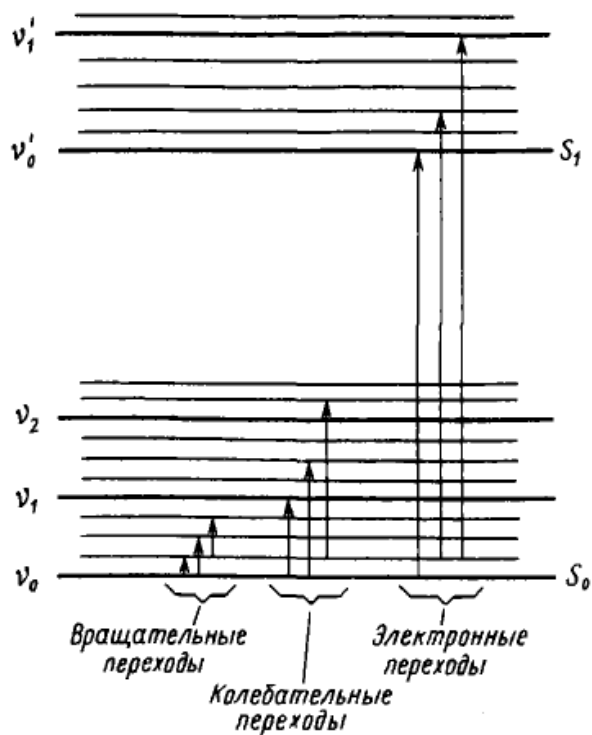


Рис.2. ІЧ-спектр полістиролу

У деяких молекулах дипольний момент з'являється при зміні типа коливань атомів.

Коливальні переходи обов'язково супроводжуються оберतालними (рис.3.), тому коливальна спектральна лінія перетворюється в смугу, що складається з безлічі ліній, а ІЧ-спектр являє собою набір смуг поглинання (ширина коливальних смуг менше електронних, оскільки різниця енергій обертових підрівнів менше, ніж коливальних).



З усіх коливальних переходів найбільш імовірними є перехід на найближчий коливальний підрівень. Йому відповідає спектральна лінія, яка називається *основною*. Менш імовірними переходами на більш високі коливальні підрівні відповідають спектральні лінії, що називаються *обертонами*. Їх частота у 2,3 рази більше, ніж частота основної лінії, а інтенсивність набагато менше. Основну лінію позначають буквою ν , а обертони 2ν , 3ν .

Рис.3. Схема енергетичних рівнів в молекулі, яка демонструє поглинання випромінювання.

Класифікація коливань ІЧ-спектрів

Нормальні коливання - незалежні повторювані самі по собі рухи молекули

(мають тільки ті молекули, у яких відбувається зміна електричного дипольного моменту зв'язку.

Валентні коливання – ν

(це нормальні коливання, при яких відбуваються зміни довжини зв'язків)

Симетричні (ν^s) – коливання, коли всі зв'язки скорочуються і розтягуються одночасно.

Антисиметричні (ν^{as}) коливання – коливання, коли всі зв'язки скорочуються і розтягуються по черзі.

Деформаційні коливання – δ і γ

(це нормальні коливання, коли відбувається зміна валентних кутів між зв'язками, утвореними з участю спільного атома)

Плоскі деформаційні коливання позначаються δ :

- ▶ ножичні;
- ▶ маятникові.

Не плоскі деформаційні коливання γ :

- ▶ парасолькові,
- ▶ крутильні
- ▶ віялові.

У спектрах існують смуги двох типів: характеристичні і нехарактеристичні. Характеристичні – смуги, які відповідають валентним коливанням певних груп атомів, зв'язків і майже не залежить від впливу всієї молекули, тобто, кожна група атомів має свою індивідуальну частоту поглинання. До характеристичних відносять смуги коливань таких груп атомів, як C–H, O–H, =N–H, C=O, C=C, –C≡N– тощо.

Нехарактеристичними називають смуги валентних і деформаційних коливань, що не можуть бути віднесені до конкретних груп атомів або зв'язків. До них належать смуги коливання зв'язків C–C, C–N усієї молекули, а не окремих фрагментів. Тому, незначні зміни в структурі молекули

приводять до істотних змін вигляду спектра. Цю ділянку спектра ще називають ділянкою «відбитків пальців», тобто, це набір смуг в інтервалі $600-1500\text{ см}^{-1}$, який важко інтерпретується і містить характерні максимуми для даної речовини (використовується для ідентифікації речовини).

3. Прилади та методика реєстрації ІЧ-спектрів

Спектрофотометри, які використовують для реєстрації ІЧ-спектрів, мають таку ж принципову схему, як і спектрофотометри для видимої і УФ-області, але відрізняються конструкцією окремих блоків.

Спектрофотометри для ІЧ-спектроскопії мають особливу конструкцію окремих блоків:

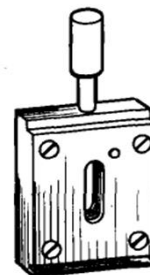
Джерела випромінювання. У ближній ІЧ-області до 3 мкм можна використовувати лампу розжарювання. В області 1-15 мкм застосовують штифт Нернста, який являє собою стержень довжиною 2 см і діаметром 1 мм, виготовлений із суміші оксидів рідкісноземельних елементів (церій, цирконій, торій, ітрій). Для отримання ІЧ-випромінювання стержень нагрівають до 1500°C . В області до 30 мкм використовують глобар. Це стержень, виконаний з силіцій карбїду, що нагрівається до 1300°C . Щоб уникнути перегріву в конструкції глобару передбачена система охолодження.

Монохроматори. Для монохроматизації потоку використовують призми з монокристалів речовин, прозорих в досліджуваній області, а також дифракційні решітки (300 штрихів на 1 мм для області 2-5 мкм і 100 штрихів на 1 мм для області 5-16 мкм) і інтерферометри Майкельсона (в спектрофотометрах з Фур'є-перетворенням).

Кювети. Для роботи з органічними рідинами або органічними розчинами в якості кювети використовують дві пластинки з хлориду натрію, закріплені в металевому кожусі.

Пробу вводять в простір між пластинками шприцом.

Для роботи з водними розчинами використовують пластини з аргентум(I) хлориду. Якщо проба - рідка органічна сполука, її зазвичай не розбавляють. Тверді сполуки розчиняють в органічному розчиннику, який не поглинає електромагнітне випромінювання в



досліджуваній області спектра. Таким розчинником найчастіше служить суміш: CCl_4 – тетрахлорметан (чотирьоххлористий вуглець), CHCl_3 – трихлорметан (хлороформ) і CS_2 – карбон дисульфід.

Якщо тверда проба не розчинна у звичайних розчинниках, її суспендують у вазеліні, нуйолі і інших оліях або змішують з порошком калій броміду і пресують у вигляді пігулки . Суспензію вводять в проміжок між пластинами з натрій хлориду, а пігулку поміщають прямо в кюветне відділення.

Детектори. Детектування сигналу в ІЧ-області ґрунтується на виділенні теплоти при поверненні молекул зі збудженого коливального стану в основний. Для цього теплову енергію перетворюють в електричний сигнал, частіше за допомогою термопари, болометра і термістора.

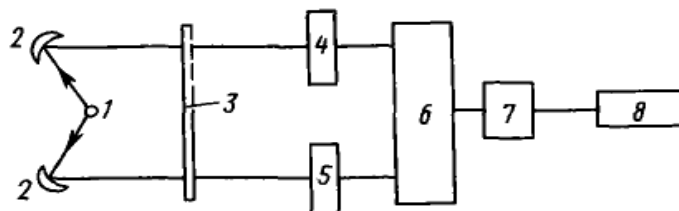


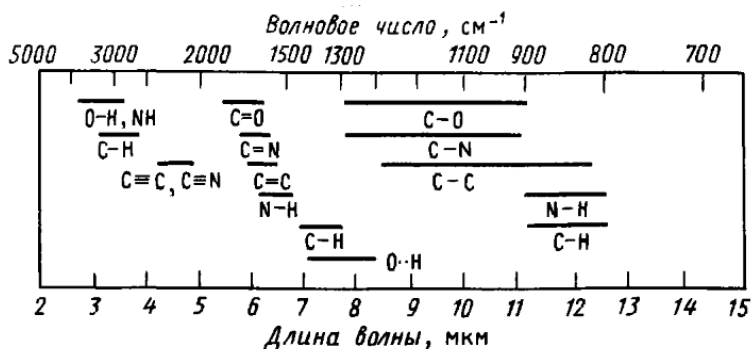
Схема ІЧ-спектрофотометра:

1–джерело випромінювання; 2– дзеркала; 3–модулятор;
4– кювета; 5– кювета порівняння; 6– монохроматор;
7– детектор; 8– індикатор.

4. Області використання ІЧ-спектроскопії

Кожний тип коливання характеризується певною енергією збудження. Валентні коливання відповідають більш високим енергіям, ніж деформаційні, отже, смуги валентних коливань знаходяться в більш короткохвильовій області.

Приблизно виділяють 4 області спектра, які пов'язані з видами коливань у групах атомів молекул:



- 1) 2,7–4,0 мкм- валентні коливання з участю атомів гідрогену (O–H, C–H, N–H, S–H);
- 2) 4,0–5,0 мкм – потрійні валентні зв'язки (C≡C, C≡N) і C=C=C;
- 3) 5,0–6,4 мкм – подвійні валентні зв'язки (C=C, C=O, C=N) і групи -COOH, -COOR, -CONH₂;
- 4) 6,0–15 мкм – одинарні валентні зв'язки (C–H, N–H), групи –CH₃, -CH₂-, -NH₂, групи з важкими атомами PO₄³⁻, SO₄²⁻, CO₃²⁻, NO₃⁻.

Застосування ІЧ-спектроскопії

➤ Якісний аналіз:

Метод застосовують для ідентифікації речовин:

- за характерними максимумами в області "відбитків пальців" при відповідних характеристичних частотах (600-1500 см⁻¹);
- шляхом порівняння спектру досліджуваної речовини зі спектром речовини-стандарту.

Для визначення структури органічних і неорганічних сполук за характерним поглинанням (максимуму в спектрі) для кожної групи атомів.

➤ Кількісний аналіз:

Визначення засновані на використанні закону Бугера-Ламберта-Бера, але сам закон в логарифмічному вигляді не використовується в зв'язку з тим, що дослідження проводять в дуже вузькій кюветі.

Інфрачервона спектроскопія широко застосовується для **аналізу біологічних рідин, зокрема крові та її фрагментів**, а останнім часом для діагностики та прогнозування різних захворювань все в зростаючій мірі використовується ротова рідина або змішана слина, проте інтерпретація отриманих результатів ускладнюється у зв'язку з багатоконпонентністю об'єктів дослідження.

Крім того, останнім часом метод знаходить все більш широке застосування для **характеристики конформаційних і структурних змін білків**, ліпідів, фосфоліпідів біомембран клітин, досліджуваних в біоптатах, при цьому використовують волоконно-оптичні методики.

За допомогою цього методу **можна оцінювати фармакінетику різних лікарських препаратів**. Доведено можливість використання показників інфрачервоного спектру для ранньої діагностики стоматологічних захворювань та прогнозування карієсу зубів у дітей.

Інфрачервона спектроскопія застосовується також **і в криміналістиці для вивчення мітохондріального геному** при ідентифікації особистості та визначенні батьківства (тому, що ідентифікується генетичний фокус DIS80, що містить змінні числа тандемних дуплікацій).

Лабораторне заняття №1

«Основи роботи з програмою IR Tutor та її можливості»

Мета: Ознайомитися з програмою IR Tutor.

План:

1. Інструктаж з техніки безпеки та правила роботи з комп'ютером.
2. Огляд робочого вікна програми.
3. Вивчення інтерфейсу програми IR Tutor.
4. Контрольні питання.

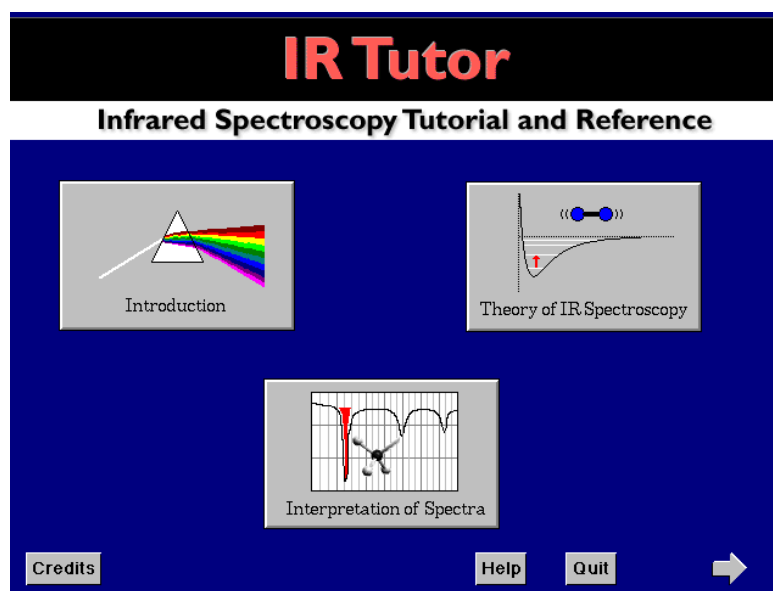
Хід роботи:

IR Tutor - це програма для навчання студентів і аспірантів основам інфрачервоної спектроскопії та вивчення спектрів деяких органічних речовин. Ця програма розроблена в 1993–1998 роках Чарльзом Абрамсом при участі Л.Авіла, Н. Дасвані, Л.Файн, Р.Хеннех. Цей проект був профінансований Перкін-Емер корпорацією, Національним науковим фондом та Колумбійським університетом, мова інтерфейсу: англійська (сайт розробника: <http://www.irtutor.com/>).

1. Щоб почати роботу програми, виконайте команду:
Пуск → Всі програми → IR Tutor. IR Tutor відкривається.
Воно має такий вигляд:



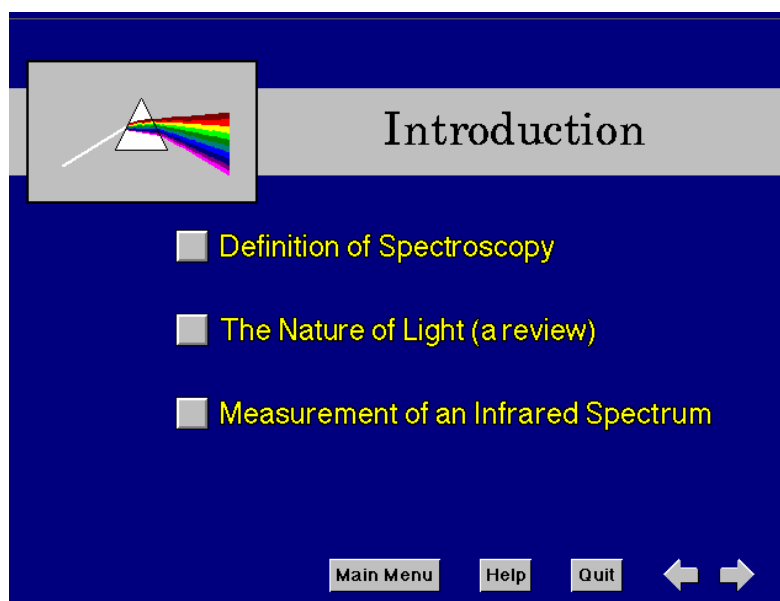
Головне меню програми, має три основні розділи:



1. Introduction – «Вступ»
2. Theory of IR Spectroscopy – «Теорія ІЧ– спектроскопії»
3. Interpretation of Spectra – «Інтерпретація спектрів».

В свою чергу ці розділи мають підрозділи.

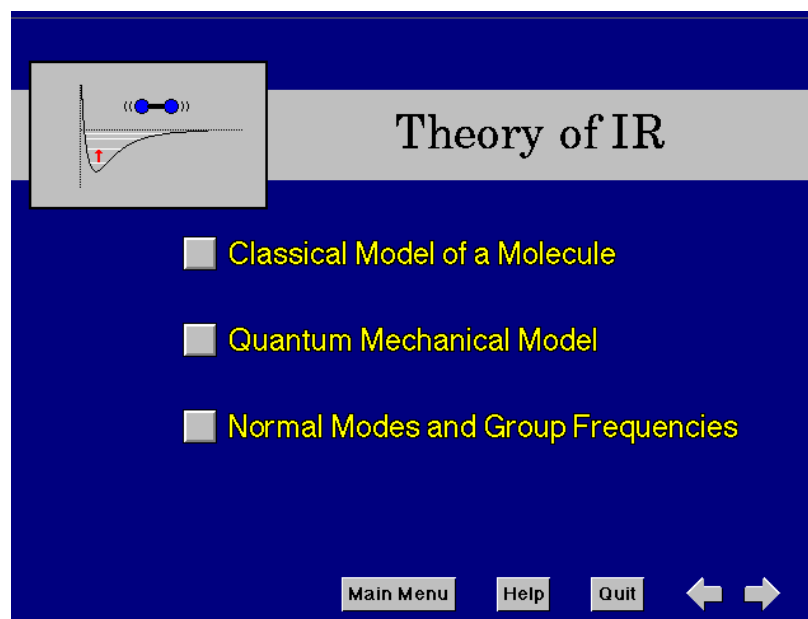
Introduction (Вступ) складається з трьох частин:



1. Definition of Spectroscopy – «Суть спектроскопії», в якому розповідається що таке ІЧ– спектроскопія та історія її виникнення.
2. The Nature of Light (a review) – «Природа світла»;
3. Measurement of an Infrared Spectrum – «Вимірювання ІЧ– спектроскопії».

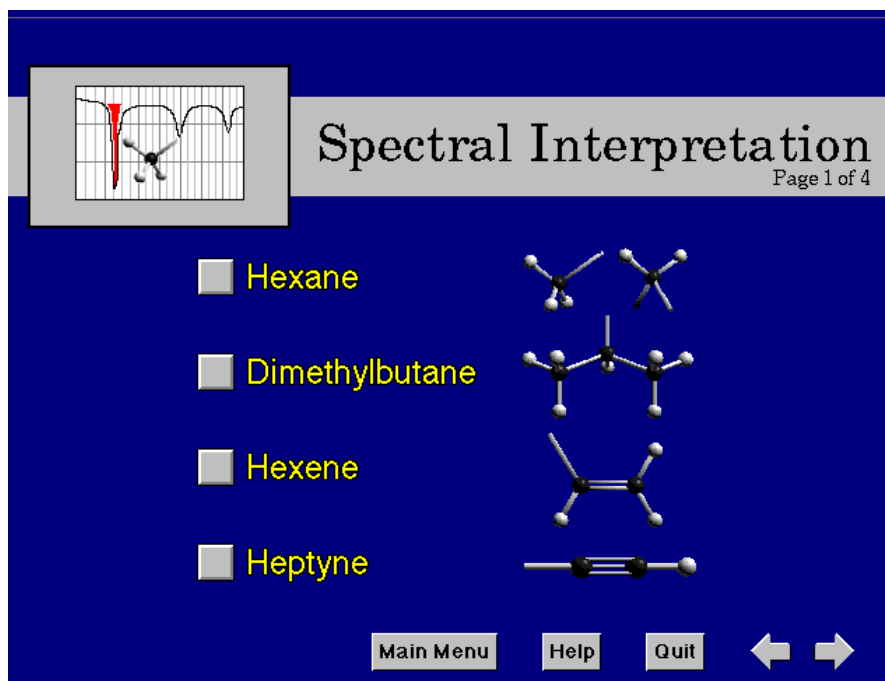
Другий розділ «*Theory of IR Spectroscopy*» (Теорія ІЧ– спектроскопії)

складається з таких підрозділів:

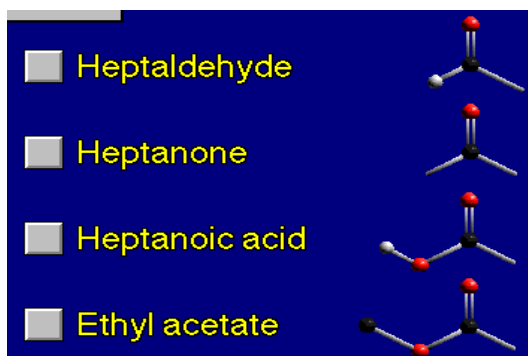
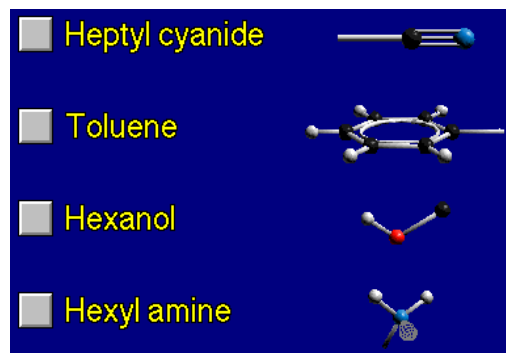
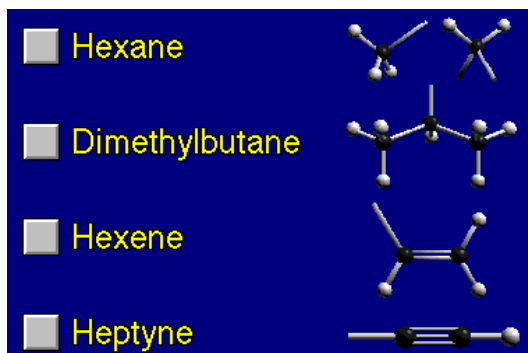


1. Classical Model of a Molecule – «Класична модель молекули»
2. Quantum Mechanical Model – «Квантово-механічна модель молекули»
3. Normal Modes and Group Frequencies – «Нормальні коливання та частоти функціональних груп».

Останній розділ «*Interpretation of Spectra*» (Інтерпретація спектрів) має такий вигляд:



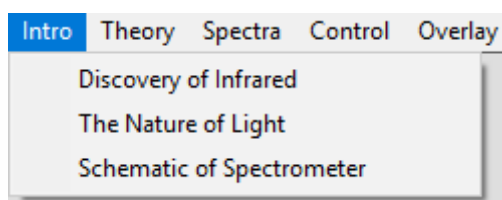
В ньому розглядаються ІЧ-спектри таких органічних сполук як: Hexane (Гексан), Dimethylbutane (Диметилбутан), Hexene (Гексен), Heptyne (Гептан), Heptyl cyanide (Гептил ціанід), Toluene (Толуол), Hexanol (Гексанол), Hexyl amine (Гексил амін), Heptaldehyde (Гептальдегід), Heptanone (Гептанон), Heptanoic acid (Гептанова кислота), Ethyl acetate (Етилацетат), Butyric anhydride (Бутановий ангідрид).



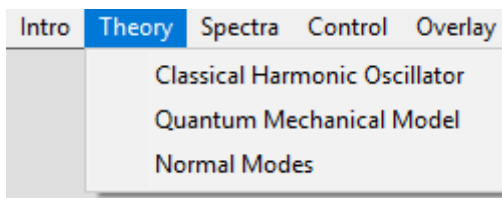
Робоче вікно програми має рядок меню, який складається з:



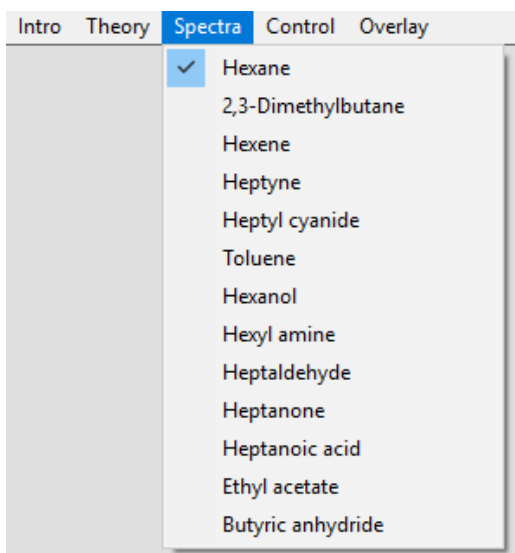
Intro – Вступ (містить три підменю–підрозділи: суть спектроскопії, природа світла, обладнання в ІЧ-спектроскопії)



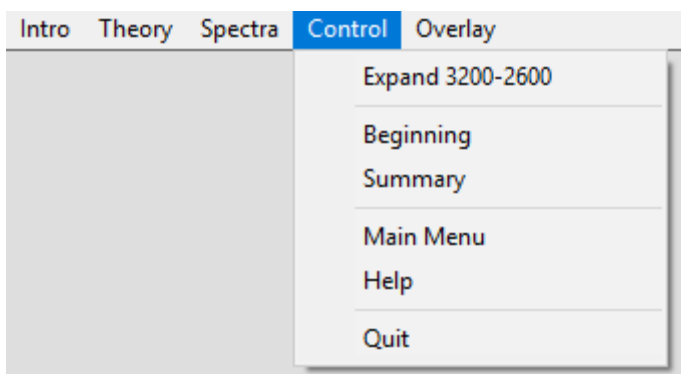
Theory – Теорія, яке складається з трьох підменю (класичний гармонічний осцилятор, квантово-механічна модель та стандартні моделі).



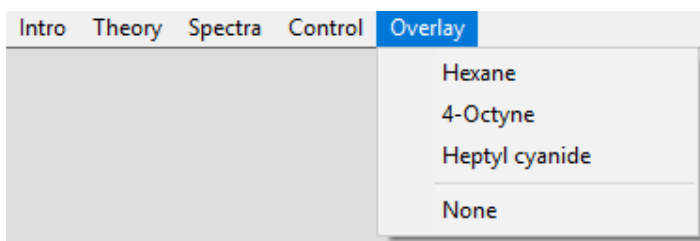
Spectra – Спектри (містить 12 підменю спектрів певних органічних речовин)



Control – контроль, має такі підменю: Expand – розширення певної ділянки спектра, Beginning – початок, Summary – підсумки, Main Menu – головне меню, Help – допомога, Quit – вихід з програми.



Overlay – має перелік спектрів речовин, які можна накладати на досліджуваний спектр з бази даних програми IR Tutor, та підменю None, що дозволяє повернутися до одинарного досліджуваного спектра без накладань.



В залежності від того, в якому розділі програми ми працюємо, рядок меню змінює свій склад. В розділах «Вступ» та «Теорія ІЧ-спектроскопії» маємо в рядку меню тільки такі підменю: Intro, Theory і Spectra. В підрозділі «Інтерпретація спектрів» активні всі п'ять підменю.

В робочому вікні програми крім рядка меню, в центрі вікна міститься слайд, внизу якого розміщений рядок:



Даний рядок складається з назви програми IR Tutor, кнопки Main Menu, кнопки Help (допомога), кнопки Quit (вихід), стрілки «праворуч» – перехід до наступного слайду, стрілки «ліворуч» – перехід до попереднього слайду. На деяких слайдах є подвійна стрілка («ліворуч» або «праворуч»), що означає перехід до наступного(або попереднього) розділу.

На слайдах, як правило, є текстові супроводження. Програма має анімаційні ефекти, які дозволяють краще зрозуміти суть фізико-хімічних явищ в ІЧ-спектроскопії. В цій програмі використовується як 2D-, так і 3D-модельовання об'єктів.

Програма дозволяє користувачу самостійно досліджувати кількісні характеристики ІЧ-спектру за енергією (Дж), хвильовим числом (cm^{-1}), довжиною хвилі (мкм).

При натисканні кнопки Help на екрані з'являються підказки, різні за змістом в залежності від розділу програми.

Незалежно від розділу програми, кожне вікно Help містить такий текст:

«одинарне натискання мишкою дозволяє перейти в таке меню:

- Main menu - повернутися до головного меню.
- Help - з'являється вікно допомоги.
- Quite- вийти з програми
- Right Arrow – перейти до наступного слайду.
- Left Arrow- перейти до попереднього слайду.

Стрілки клавіатури можуть бути використані замість стрілок на слайді (натисніть на будь-яку кнопку для переходу)».

В залежності від розділу вікно «Допомога» має свої особливості, в цій частині дається короткий опис розділу та подаються особливості користування кнопками керування в цьому розділі програми.

Вікно «Допомога» в підрозділі «Інтерпретація спектра» має додаткове меню:

Expand	(At bottom of chart) Expand region indicated.
Full Spectrum	(At bottom right of chart) Return to full scale.
(Peaks)	Click on a peak to see the assignment.
Spectra (Menu)	Go directly to other spectra.
Control (Menu)	Menu version of the controls described above.
Overlay (Menu)	Choose a spectrum to compare.

- Expand –розширити виділену область спектру.
- Full spectrum –повернутися до повного спектру речовини.
- (Peaks) – клацнути на пік, щоб побачити його характеристику.
- Spectra (menu- рядок)-перейти до спектру іншої речовини.
- Control (menu- рядок) - версія меню для контролю спектру, що вивчаємо.
- Overlay (menu-рядок)- обрати спектр для накладання.

Слайди зі спектрами речовин мають структурні формули речовин, та мають кнопку **Expand**, яка дозволяє розглянути певні характерні ділянки даного спектру з подальшим поверненням в повноекранний режим за допомогою кнопки **Full Spectrum**. ІЧ-спектри речовин подані в координатах вісь ОХ – хвильове число ν , cm^{-1} (400-4000) та вісь ОУ- коефіцієнт світлопропускання T,% (0-1,0). Натиснувши на пік в спектрі, можна побачити анімацію відповідного коливання. Опції Expand (Розширити) та Overlay (Накладання) дозволяють самостійно навчитися розшифровувати і інтерпретувати ІЧ-спектри.

Контрольні питання:

1. Скільки розділів містить програма IR Tutor?
2. Які ІЧ-спектри органічних сполук розглядаються в розділі Interpretation of Spectra?
3. За допомогою якої функції програмі IR Tutor ми можемо обрати спектр для накладання?

Лабораторне заняття №2

Тема: «Природа світла та теоретичні основи ІЧ-спектроскопії з використанням програми Ir Tutor»

Мета:

Навчальна: засвоєння наукових теорій, сформувати вміння про користування програми Ir Tutor, розширити і поглибити знання з теорії ІЧ-спектроскопії, природу світла, електричне і магнітне поле, площу поляризованого світла.

Розвивальна: розвивати вміння аналізувати, спостерігати як розвивалася ІЧ-спектроскопія за допомогою програми Ir Tutor; вчити застосовувати комп'ютерні технології при вивченні хімії.

Виховна: виховувати пізнавальний інтерес, формувати науковий світогляд, розширити кругозір учнів, виховувати вміння слухати та спостерігати.

Обладнання: комп'ютер зі встановленою програмою Ir Tutor.

Тип заняття: засвоєння нових знань.

Методи: бесіда, робота за комп'ютером з програмою Ir Tutor.

Хід заняття

У сучасних фізико-хімічних дослідженнях широко застосовують спектральні методи. Ці методи все більше застосовують у хімічній технології, у технічному аналізі хіміко-фармацевтичних препаратів, в аптечній практиці з використанням комп'ютерних технологій. Інфрачервоні спектри дають достатньо повну характеристику речовин. Наявність в ІЧ-спектрах тих чи інших смуг поглинання дозволяє розшифровувати структуру речовини.

Тому тема лабораторного заняття: «Природа світла та теоретичні основи ІЧ- спектроскопії з використанням програми Ir Tutor».

Програма Ir Tutor, розділ I: **Definition of Spectroscopy.**

Що таке інфрачервона спектроскопія?

Історія інфрачервоної спектроскопії починається з Ісаака Ньютона (1645-1727). Він провів експеримент, в якому промінь сонячного світла проходить через віконні ставні у темну кімнату. (Див. слайд 1.1.1)¹

Розміщуючи призму в пучку світла, Ньютон показав, що біле світло складається з різних кольорів. Фіолетовий промінь відхилений призмою найбільше, а червоне світло відхилене вміру. Хоча це було відомо до Ньютона, але він був першим, хто описав це точно. (Див. слайд 1.1.2)

Набагато пізніше, Фредерік Вільям Гершель припустив існування інших компонентів білого світла, за межами видимої області. Область після червоної частини видимого спектру, називається інфрачервоною (ІЧ) областю. (Див. слайд 1.1.3)

Оскільки ця область є невидимою для людського ока, Гершелю потрібен був спосіб її виявити. Ртутний термометр дав відповідь на його питання. При розміщенні в промені інфрачервоного світла, термометр нагрівається вище кімнатної температури. (Див. слайд 1.1.4)

Нарешті в березні 1800 року, Гершель помістив зразок води зі свердловини на шляху променя. Різниця між еталонною температурою ІЧ-світла (без перешкод) і ІЧ-світла після проходження через зразок води є мірою поглинання ІЧ-світла водою. (Див. слайд 1.1.5)

Змінюючи частину ІЧ-спектра, яка проходить через зразок, Гершель показав що поглинання залежить від довжини хвилі (або «колір») інфрачервоного світла. (Див. слайд 1.1.6)

Інфрачервона спектроскопія є вимірювання поглинання інфрачервоного світла зразком. Але що таке світло? (Див. слайд 1.1.7)

У наступному розділі програми Ir Tutor розглянемо природу світла (The Nature of Light).

¹ Слайд 1.1.1, де перша цифра - номер розділу програми IR Tutor; друга цифра - номер підрозділу цієї програми; третя цифра - номер слайда в підрозділі.

Ісаак Ньютон і (значно пізніше) Фредерік Вільям Гершель показали, що біле світло складається з різних кольорів видимого та інших, невидимих «кольорів», таких як інфрачервоні. (Див. слайд 1.2.1)

Видиме та інфрачервоне світло являють собою лише невелику частину електромагнітного спектра і інфрачервоне світло є безбарвним діапазоном світлової енергії. (Див. слайд 1.2.2)

Спектр називається електромагнітним, тому що світло може бути описане як комбінація змінних електричних і магнітних полів, як показано в додатку 3. Ця діаграма показує площину поляризованого світла, яка називається так тому, що електричне поле завжди лежить в одній площині. (Див. слайд 1.2.3)

Зміна електричного поля може бути описана його довжиною хвилі (λ), довжиною одного періоду коливань, або його частотою (ν), числом циклів, які проходять через точку за одну секунду. Вони пов'язані формулою $\lambda = c / \nu$, де c – швидкість світла ($3,0 \cdot 10^{10}$ см/сек). (Див. слайд 1.2.4)

Довжина хвилі променя світла визначає його положення в електромагнітному спектрі. Часто більш зручно використовувати хвильове число $\bar{\nu}$, що визначається як обернена довжина хвилі. Енергія світла пов'язана з його довжиною хвилі формулою: (Див. слайд 1.2.5)

$$E = \frac{hc}{\lambda} = hc\bar{\nu}$$

де, h - стала Планка ($6,62 \times 10^{-34}$ Дж \times с).

На кадрі №5 (розділ Introduction, підрозділ the nature of light (a review) програми IR Tutor можна інтерактивно вивчати інфрачервону область електромагнітного спектру, при цьому змінюється довжина хвилі, хвильове число та енергія електромагнітного випромінювання (працюємо з індикатором ліворуч на кадрі).

Випромінювання в середині інфрачервоної області (~ 4000 - 400 см $^{-1}$) відповідає частоті коливання молекул. Теорія молекулярних коливань пояснює появу інфрачервоних спектрів. (Див. слайд 1.2.6)

Таким чином, за допомогою програми Ir Tutor ми можемо оволодіти знаннями щодо історії дослідження ІЧ-спектроскопії та природи світла.

Контрольні питання:

1. Який експеримент провів Ісаак Ньютон?
2. Яке припущення висунув Фределік Вільям Гершель щодо ІЧ-спектрів ?
3. Чому спектр називається електромагнітним?
4. Які кількісні характеристики електромагнітного спектру ви знаєте?

Лабораторне заняття №3

Тема: «Інтерпретація ІЧ-спектрів органічних речовин» з використанням програми IR Tutor.

(Варіанти лабораторних робіт на вибір: «1-гексан»; «1-гексен»).

Мета:

Навчальна: сформувати вміння про користування програми Ir Tutor, розширити і поглибити знання з теорії ІЧ-спектроскопії, навчитися ідентифікувати різні групи в спектрах інших вуглеводнів за допомогою функції «накладання».

Розвивальна: розвивати вміння аналізувати, спостерігати за різними видами спектрів ІЧ-випромінювання за допомогою програми Ir Tutor; вчити застосовувати комп'ютерні технології при вивченні хімії.

Виховна: виховувати пізнавальний інтерес, формувати науковий світогляд, розширити кругозір студентів, виховувати вміння слухати та спостерігати.

Обладнання: комп'ютер зі встановленою програмою Ir Tutor.

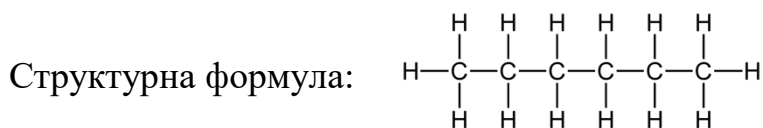
Тип заняття: засвоєння нових знань.

Методи: робота за комп'ютером з програмою Ir Tutor.

Хід заняття

В програмі IR Tutor подані спектри 12 органічних речовин.

Гексан являє собою насичений вуглеводень з хімічною формулою C₆H₁₄.

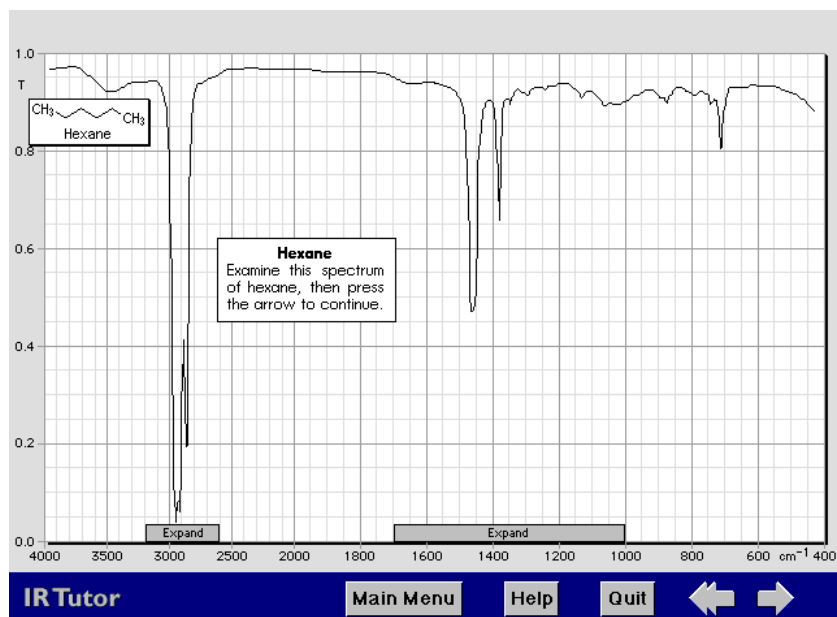


Це рідина, для дослідження ІЧ-спектру якої, її поміщали в кювету з пластинами із KBr. В спектрі гексану багато широких піків, що є ознакою насичених молекул. У насичених молекул є багато піків з низькими енергіями. Широкі піки утворюються накладанням абсорбції декількох структур в молекулі (CH₂- та CH₃- групи). (Див. слайд 3.1.2)

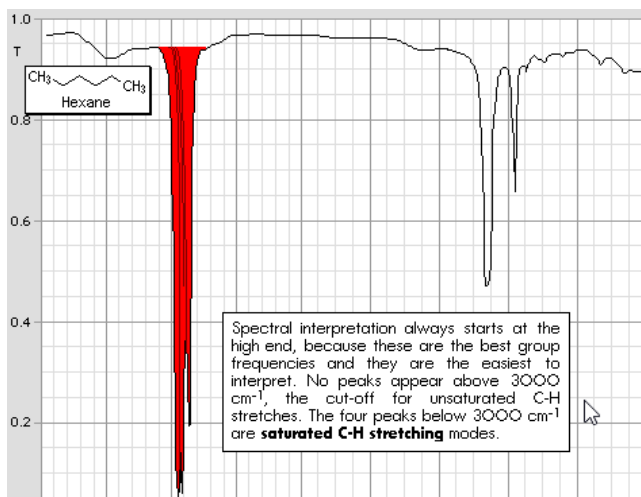
Інтерпретацію спектрів завжди починають зліва направо, тобто, з високо енергетичних піків, які найлегше інтерпретувати.

Поглинання вище 3000 cm^{-1} характерні для ненасичених зв'язків С-Н, яких немає в структурі гексану.

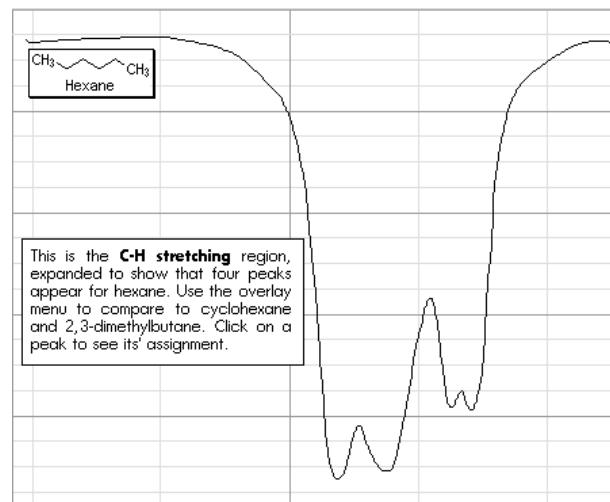
Взагалі, аналізуючи спектр гексану можна виділити чотири основних виражених піки.



Перший складний пік є найбільший за амплітудою і має чотири вершини, пов'язаних з антисиметричними та симетричними коливаннями CH_3 - та CH_2 -груп.

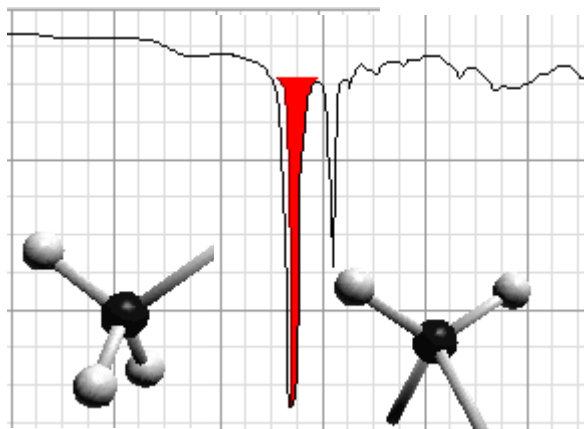


Загальний вигляд першого складного піку гексана

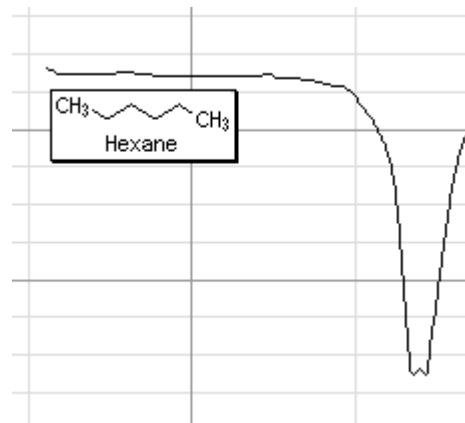


Вигляд першого складного піку гексана за допомогою функції *Expand* (розширити)

Другий пік має дві вершини і його амплітуда в 2 рази менше, ніж першого піку, і пов'язаний з антисиметричним коливанням CH_3 -групи та деформаційних коливань CH_2 -групи «ножиці».

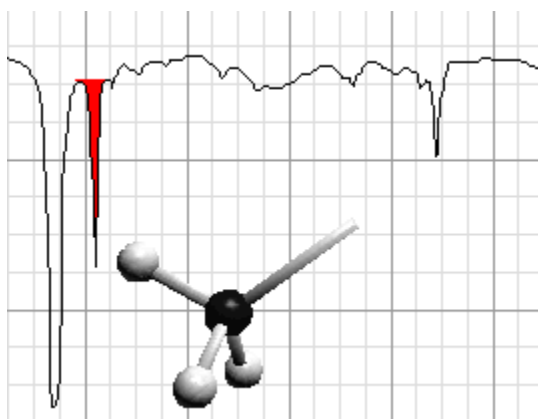


Загальний вигляд другого піку гексана

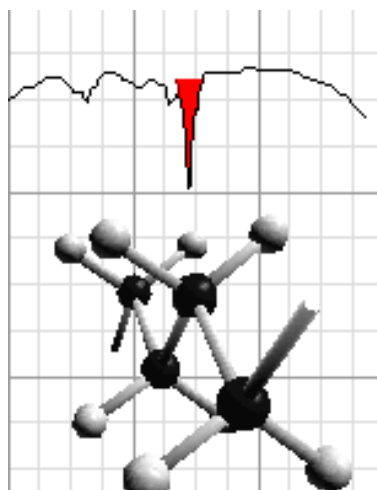


Вигляд другого піку гексана за допомогою функції *Expand*

Третій пік обумовлений симетричним коливанням CH_3 -групи «парасолька», і за амплітудою в чотири рази менший, ніж перший.



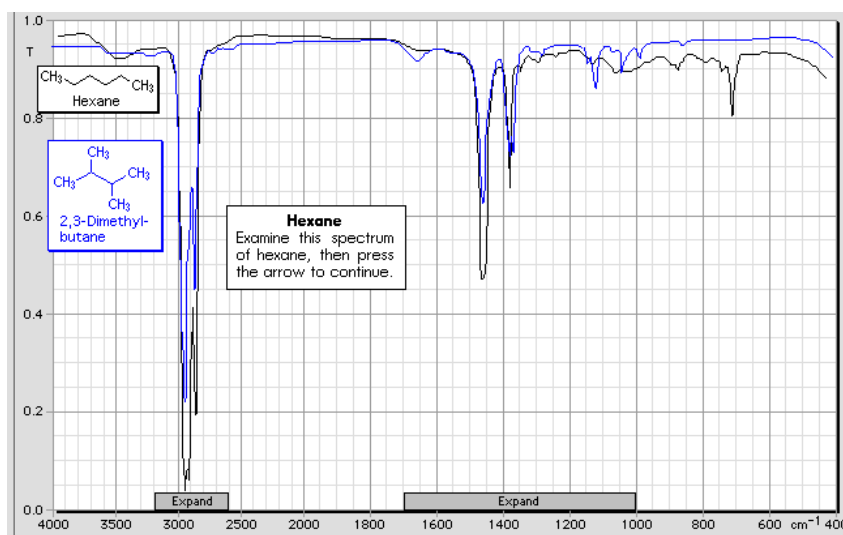
Четвертий пік обумовлений коливанням ланки чотирьох CH_2 -груп з амплітудою в вісім разів меншою, ніж амплітуда першого піку.



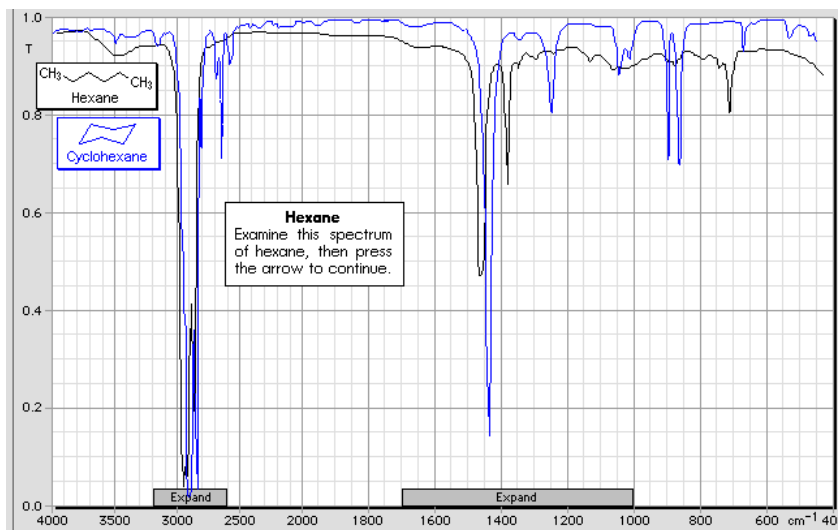
Розглянемо **перший складний пік** ІЧ-спектру гексану, в якому розрізняємо чотири вершини, нижче частоти 3000cm^{-1} : (Див. слайд 3.1.3)

1. $\nu=2962\text{ cm}^{-1}$ характерний для антисиметричного коливання CH_3 - групи; (Див. слайд 3.1.4)
2. $\nu=2926\text{ cm}^{-1}$, характерний для антисиметричного коливання CH_2 - групи; (Див. слайд 3.1.5)
3. $\nu=2872\text{ cm}^{-1}$, характерний для симетричного коливання CH_3 - групи; (Див. слайд 3.1.6)
4. $\nu=2853\text{ cm}^{-1}$ – характерний для симетричного коливання CH_2 -групи. (Див. слайд 3.1.7)

За допомогою накладання на спектр гексану спектру 2,3-диметилбутану, ми можемо ідентифікувати коливання CH_3 - груп ($\nu=2962, 2872\text{ cm}^{-1}$). Для 2,3-диметилбутану частоти коливання CH_2 -груп відсутні.



Накладанням на спектр гексану спектру циклогексану ми можемо ідентифікувати абсорбційне коливання CH_2 -груп ($\nu=2926, 2853\text{ cm}^{-1}$). Для циклогексану коливання CH_3 -груп відсутні.



Розглянемо **другий складний пік** ІЧ-спектру гексану з двома вершинами.

При $\nu=1460\text{ см}^{-1}$ спостерігаємо антисиметричне коливання CH_3 - групи, яке характерне і для CH_3 -груп 2,3-диметилбутану. (Див. слайд 3.1.8)

При $\nu=1455\text{ см}^{-1}$ спостерігається деформаційне коливання CH_2 -групи, яке характерне і для деформаційного коливання CH_2 -груп циклогексану. (Див. слайд 3.1.9)

Третій пік ІЧ-спектру гексану має одну вершину. При $\nu=1375\pm 10\text{ см}^{-1}$ спостерігаємо симетричне коливання «парасолька» CH_3 -групи, яке характерне і для CH_3 -групи 2,3-диметилбутану і нехарактерне для CH_2 -груп циклогексану. (Див. слайд 3.1.10)

В області частот $1350\text{-}725\text{ см}^{-1}$ маємо **область «відбитків пальців»**, за якою можна ідентифікувати гексан, співставляючи спектр з довідковим спектром гексану. В цій області гексан має багато мало виражених піків. (Див. слайд 3.1.11)

Четвертий пік спектру гексану має $\nu=720\pm 10\text{ см}^{-1}$, визваний коливанням ланки із чотирьох CH_2 -груп. (Див. слайд 3.1.12)

Таким чином, в спектрі н-гексану ми розрізняємо: (Див. слайд 3.1.13)

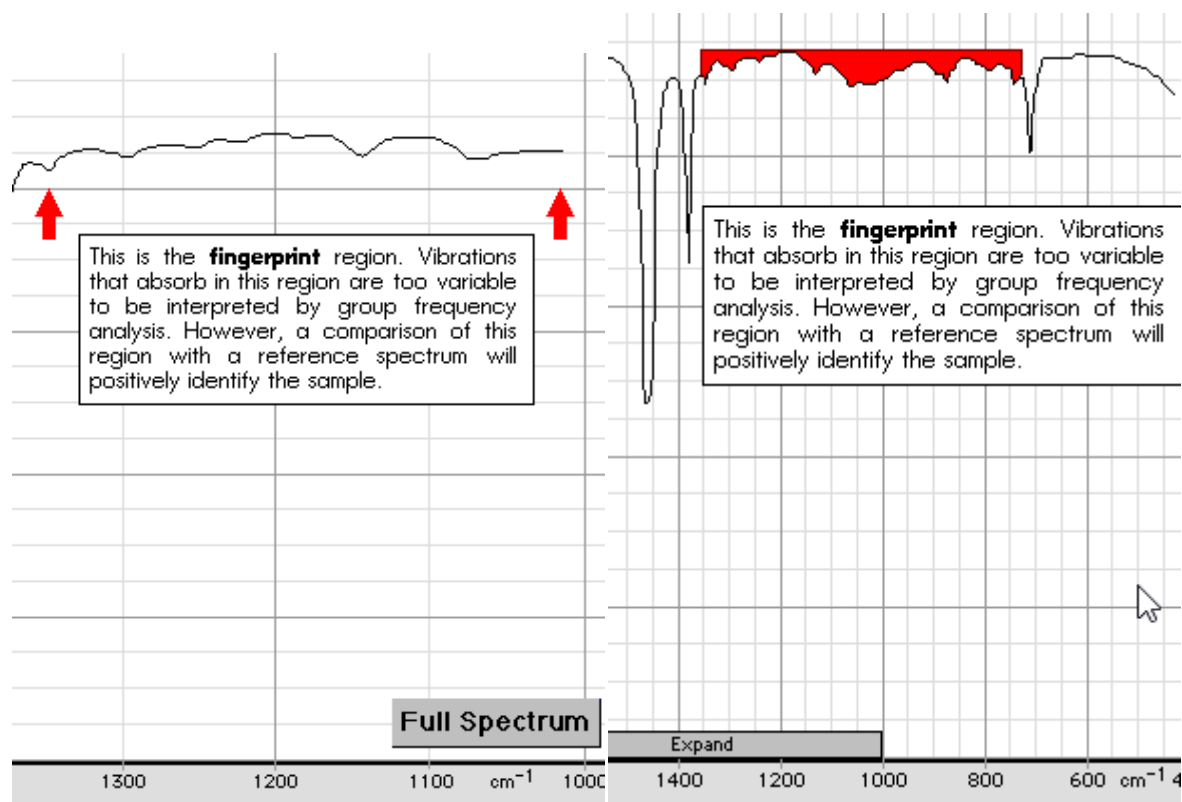
1. Чотири піки, пов'язаних з присутністю групи CH_3 :

- 2962 см^{-1} антисиметричне коливання
- 2872 см^{-1} симетричне коливання
- 1460 см^{-1} антисиметричне коливання
- 1375 см^{-1} симетричне коливання «парасолька».

2. Розрізняємо чотири піка які вказують на присутність : (Див. слайд 3.1.14)

- 2926 cm^{-1} антисиметричне коливання
- 2853 cm^{-1} симетричне коливання
- 1455 cm^{-1} деформаційне коливання «ножиці»
- 720 cm^{-1} коливання ланки із чотирьох CH_2 -груп.

Спектр гексану містить область «відбитків пальців» (1350-725 cm^{-1})



Вигляд області «відбитків пальців» за допомогою функції *Expand* (розширити)

Загальний вигляд області «відбитків пальців»

Таким чином, за допомогою ІЧ спектру н-гексану ми можемо ідентифікувати цю сполуку за областю «відбитків пальців», та вивчити характерні частоти коливання CH_3 -груп та CH_2 -груп, та ідентифікувати ці групи в спектрах інших вуглеводнів.

Інтерпретація спектру 1-гексену

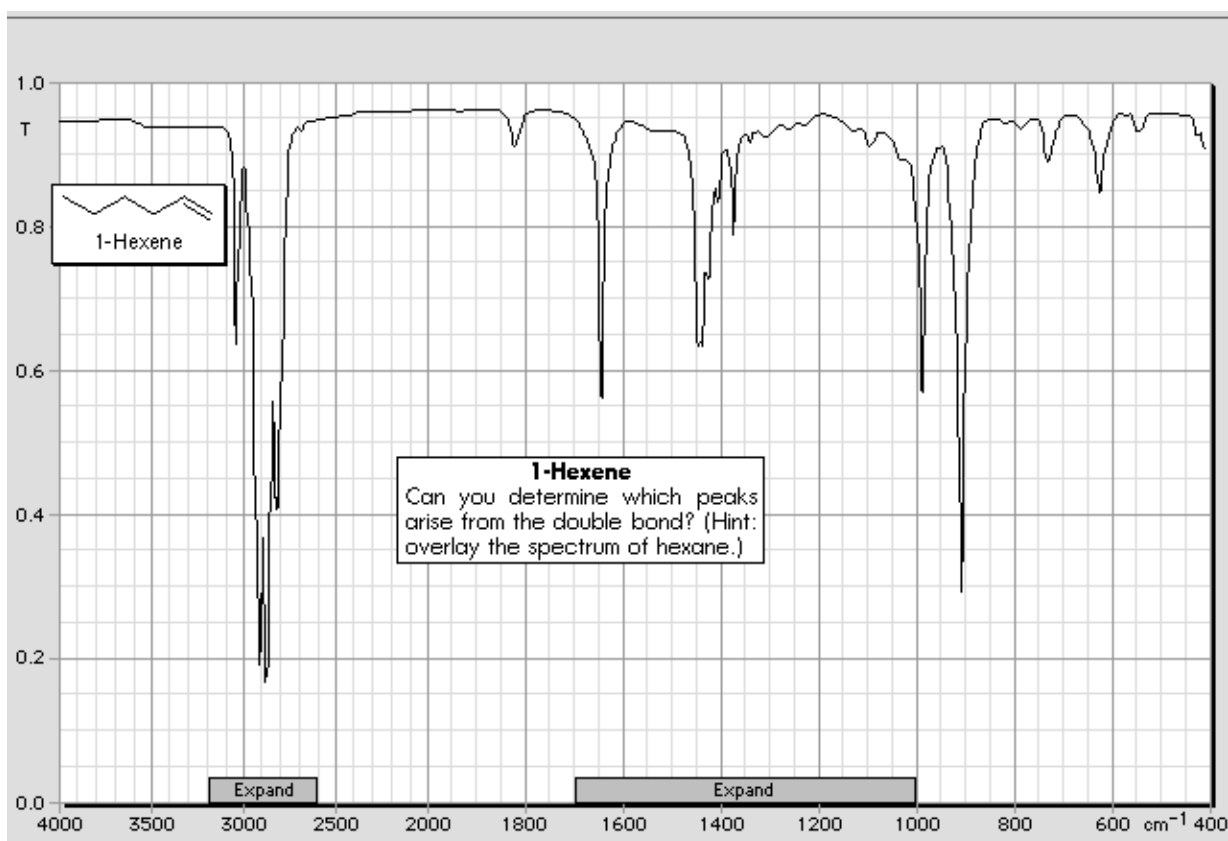
В програмі Ir Tutor існує функції «накладання», за допомогою якої ми на спектр 1-гексену накладемо спектр гексану, і зробимо відповідні висновки.

1-гексен являє собою $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ ненасичений вуглеводень з хімічною формулою C_6H_{12} . В спектрі 1-гексену багато гострих вузьких та широких піків, що є ознакою ненасиченості молекули.

Інтерпретацію спектрів завжди починають зліва направо, тобто, з високо енергетичних піків, які найлегше інтерпретувати.

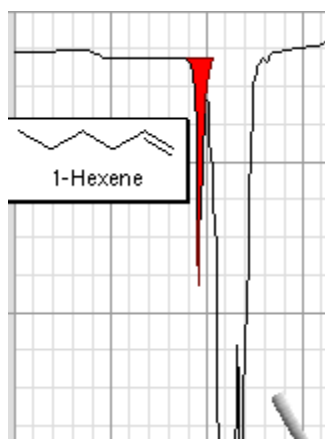
Характеристичні смуги поглинання для алкенів, що лежать вище від 3000 cm^{-1} , відповідають валентним коливанням $\nu(\text{C-H})$ -групи. Частота і інтенсивність даного поглинання досить чутливі до оточення ненасиченого центру.

Взагалі, аналізуючи спектр 1-гексену можна виділити вісім основних виражених піки.

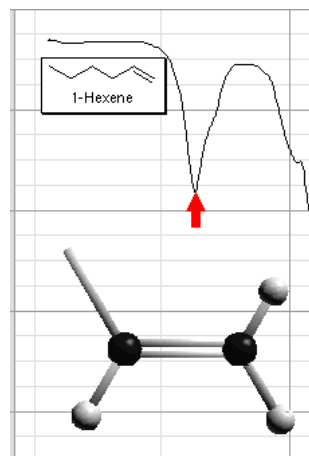


Перший пік – найхарактерніший 3080 cm^{-1} відповідає $=\text{CH}_2$ групі і чітко відокремлений від основної смуги поглинання груп CH_3 , CH_2 .

(Див. слайд 3.3.2)

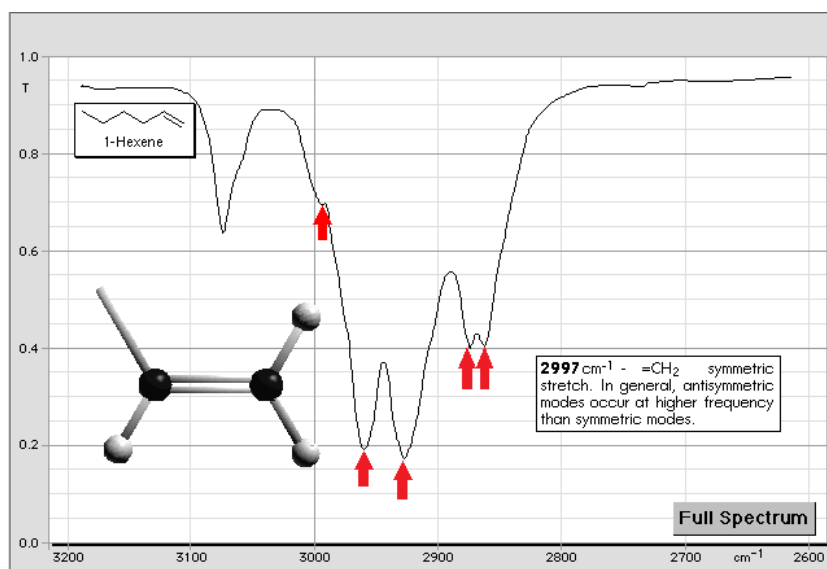


Загальний вигляд першого піку гексену



Вигляд першого піку гексену за допомогою функції *Expend*

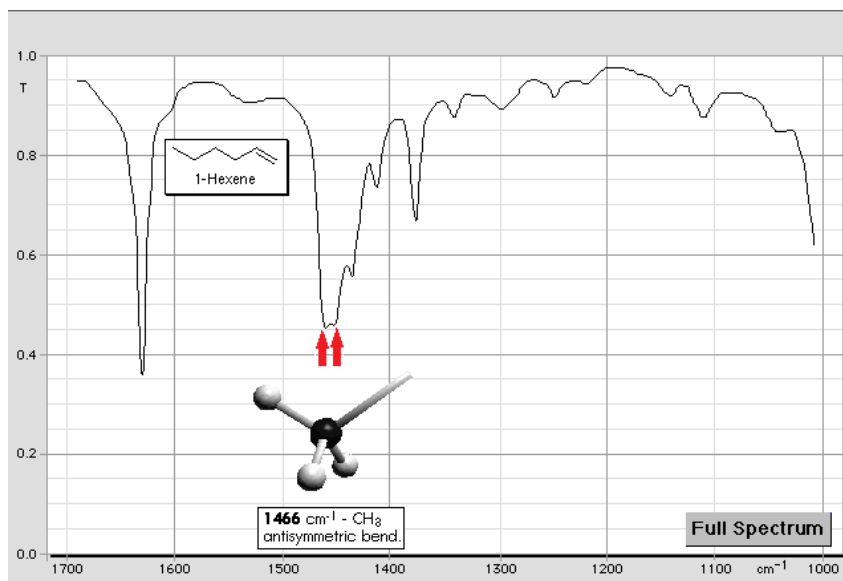
Другий складний пік є найбільший за амплітудою і має п'ять вершини, пов'язаних з коливанням CH_3 - та CH_2 - та $=\text{CH}_2$ груп, антисиметричних та симетричних.



Третій пік має одну вершину і він за своєю амплітудою найменший серед усіх піків.

Четвертий пік обумовлений коливанням $-\text{C}=\text{C}$ групи і за амплітудою в два рази менший, ніж другий.

П'ятий пік має дві вершини і його амплітуда в 3 рази менше, ніж другий пік, і пов'язаний з антисиметричним коливанням CH_3 -групи та деформаційних коливань CH_2 -групи «ножиці».



Шостий пік має одну вершину і його амплітуда в 2 рази більша за третій пік, і пов'язаний з деформаційним коливанням $-\text{CH}_3$ групи «парасолька».

Сьомий і восьмий пік обумовлений коливанням $=\text{CH}_2$ групи і за амплітудою однакові з четвертим піком.

Розглянемо **перший пік** ІЧ-спектру 1-гексену, який має вузький та гострий вигляд. Він є найхарактернішим. Область з $\nu=3080 \text{ cm}^{-1}$ характерна для антисиметричне коливання $=\text{CH}_2$ -групи. Поглинання більше 3000 cm^{-1} вказує на присутність ненасиченості (подвійний або потрійний зв'язок або ароматичне кільце). (Див. слайд 3.3.2)

Розглянемо **другий складний пік**, в якому розрізняємо п'ять вершин, нижче частоти 3000 cm^{-1} : (Див. слайд 3.3.2)

1. $\nu=2997 \text{ cm}^{-1}$ характерна для симетричного коливання $=\text{CH}_2$ -групи; (Див. слайд 3.3.3)
2. $\nu=2960 \text{ cm}^{-1}$, характерна для антисиметричного коливання CH_3 - групи; (Див. слайд 3.3.4)
3. $\nu=2924 \text{ cm}^{-1}$, характерна для антисиметричного коливання CH_2 - групи; (Див. слайд 3.3.5)

4. $\nu=2870 \text{ см}^{-1}$, характерна для симетричного коливання CH_3 -групи;
(Див. слайд 3.3.6)
5. $\nu=2861 \text{ см}^{-1}$, характерна для симетричного коливання CH_2 -групи.
(Див. слайд 3.3.7)

За допомогою накладання на спектр 1-гексену спектр н-гексана, ми можемо ідентифікувати коливання CH_3 -груп ($\nu=2962, 2872 \text{ см}^{-1}$) та CH_2 -груп ($\nu=2926, 2853 \text{ см}^{-1}$).

Розглянемо **третій найменший пік** ІЧ-спектру 1-гексену. При $\nu=1821 \text{ см}^{-1}$ спостерігаємо неплосинне обертональне коливання. Це - подвоєна частота основного коливання з піком 909 см^{-1} (сірий колір). (Див. слайд 3.3.8)

Четвертий пік ІЧ-спектру 1-гексену має одну вершину. При $\nu=1642 \text{ см}^{-1}$ спостерігаємо коливання $-\text{C}=\text{C}$ групи. Нормальний діапазон коливань для даного піку при $\nu=1640+20 \text{ см}^{-1}$ для цис і вініл груп а $\nu=1670+10 \text{ см}^{-1}$ для транс групи. (Див. слайд 3.3.9)

П'ятий пік має дві вершини:

1. $\nu=1466 \text{ см}^{-1}$ характерна для антисиметричного коливання $-\text{CH}_3$;
(Див. слайд 3.3.10)
2. $\nu=1455 \text{ см}^{-1}$ характерна для деформаційного коливання CH_2 -групи «ножиці». (Див. слайд 3.3.11)

Шостий пік має одну єдину вершину з $\nu=1379 \text{ см}^{-1}$ яка пов'язана з деформаційним коливанням CH_3 -групи «парасолька». (Див. слайд 3.3.12)

За допомогою накладання на спектр 1-гексену спектр н-гексана, ми можемо ідентифікувати коливання CH_3 -груп ($\nu=1460, 1375 \text{ см}^{-1}$) та CH_2 -груп ($\nu=1455 \text{ см}^{-1}$).

Сьомий пік має одну вершину з $\nu=993 \text{ см}^{-1}$ – неплосинне коливання $=\text{CH}_2$ -групи. Тільки однозаміщені або подвійні зв'язки мають такі коливання, що пояснюється транс-положенням Н-атомів відносно карбону. Цис-подвійні зв'язки мають інше неплосинне коливання. (Див. слайд 3.3.13)

Восьмий пік має також одну вершину з $\nu=909 \text{ см}^{-1}$ - неплосинне коливання $=\text{CH}_2$ групи. Тільки подвійні зв'язки з двома гідрогенами на кінці мають таке поглинання. (Див. слайд 3.3.14)

В області частот 1350-400 cm^{-1} область «відбитків пальців». Порівняння цієї області з довідковим спектром позитивно ідентифікує зразок. Відзначте відсутність CH_2 -коливання при 720 cm^{-1} (воно характерне тільки тоді, коли 4 або більше CH_2 групи будуть в ланцюзі). (Див. слайд 3.3.15)

Таким чином, в спектрі 1-гексену ми розрізняємо:

Чотири піки, пов'язаних з присутністю групи $\text{C}=\text{C}$: (Див. слайд 3.3.16)

- 3080, 2997 cm^{-1} - CH_2 коливання;
- 1640 cm^{-1} - $\text{C}=\text{C}$ коливання;
- 1821, 909 cm^{-1} - $=\text{CH}_2$ неплосинне коливання;
- 993 cm^{-1} - $=\text{CH}_2$ неплосинне коливання.

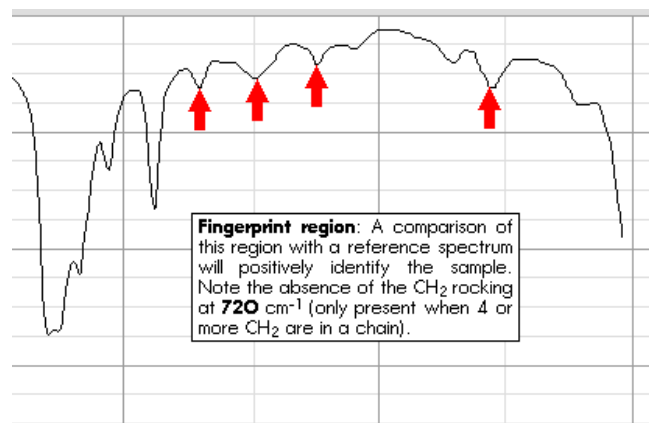
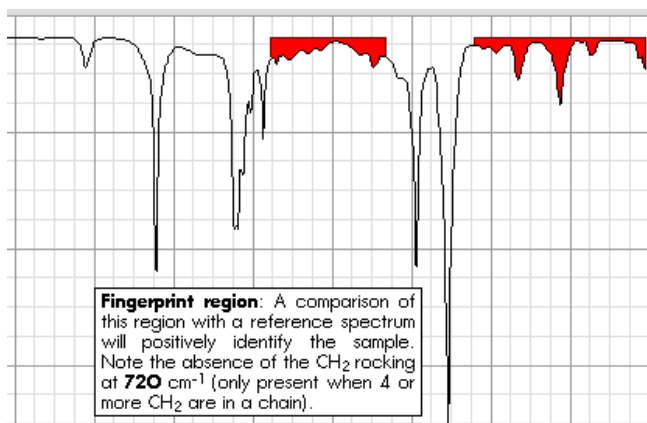
Чотири піки, пов'язаних з присутністю групи CH_3 : (Див. слайд 3.3.17)

- 2960, 2870 cm^{-1} - коливання;
- 1466 cm^{-1} - антисиметричне коливання;
- 1379 cm^{-1} - коливання «парасолька».

Розрізняємо чотири піки, які вказують на присутність CH_2 -груп: (Див. слайд 3.3.18)

- 2924, 2861 cm^{-1} - коливання.
- 1455 cm^{-1} - коливання «ножиці».

Спектр гексену містить область «відбитків пальців» (1350-400 cm^{-1}).



Загальний вигляд області «відбитків пальців» спектру гексену

Вигляд області «відбитків пальців» спектру гексену за допомогою функції Expend (розширити)

Таким чином, за допомогою ІЧ спектру 1-гексену ми можемо ідентифікувати цю сполуку за областю «відбитків пальців», та вивчити характерні частоти коливання CH_3 -груп та CH_2 - та $\text{C}=\text{C}$ -груп, та ідентифікувати ці групи в спектрах інших вуглеводнів за допомогою функції «накладання».

Контрольні питання:

1. Які коливання ми можемо ідентифікувати за допомогою накладання на спектр гексану спектру 2,3-диметилбутану.
2. Яка кількість піків вказують на присутність CH_2 -груп?
3. Який найхарактерніший пік в ІЧ-спектрі 1-гексену?
4. Які коливання ми можемо ідентифікувати за допомогою накладання на спектр 1-гексену спектр n-гексана?
5. В якій області частот 1-гексену знаходиться область **«відбитків пальців»?**

Література:

1. Бранд Дж. Применение спектроскопии в органической химии / Дж. Бранд, Г. Эглинтон. – М.: «Мир», 1967. – С. 34–50.
2. Величко Л. П., Перешивана Л. М. Актуальність ознайомлення учнів з фізичними методами ідентифікації органічних речовин / Л. П. Величко, Л. М. Перешивана // Біологія і хімія в школі. – 2005. – №4. – с. 50–51.
3. Вершинин В. И. Компьютерная идентификация органических соединений / В. И. Вершинин, Б. Г. Дерендяев, К. С. Лебедев. – М.: «Академкнига», 2002. – 197 с.
4. Єзіков В. І. Спектральні методи аналізу. Робоча програма навчальної дисципліни / В. І. Єзіков. – Херсон, 2012. – 11 с. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://univer.nuczu.edu.ua/tmp_metod/2139/Robnavch-pr-%B2MHA.pdf
5. Иоффе Б. В., Костиков Р. Р., Разин В. В. Физические методы определения строения органических соединений / Б. В. Иоффе, Р. Р. Костиков, В. В. Разин. – М.: «Высш. шк.», 1984. – 336 с.
6. Казицина Л. А. Применение ИК- и УФ-спектроскопии в органической химии / Л. А. Казицына, Н. Б. Куплетская. – М.: «Высш. Школа», 1971. – 264 с.
7. Кросс А. Введение в практическую инфракрасную спектроскопию / А. Кросс. – М.: 1961. – 215 с.
8. Перешивана Л. М. Вивчення факультативного курсу «Дослідження органічних речовин методами оптичної спектроскопії» / Л. М. Перешивана // Біологія і хімія в школі. – 2007, №1. – с. 34–37; №2. – с. 51–53; №3. – с. 44–45; №5–6. – с. 49–51; 2008. – №1. – с. 34–36; №3. – с. 44–47; №4. – с. 43.
9. Перешивана Л. М. Факультативний курс з фізичних методів дослідження органічних сполук / Л. М. Перешивана // Матеріали звітної наукової конференції «Зміст і технології шкільної освіти». Ч. II. – К.: Педагогічна думка, 2005. – с. 7.
10. Довгопола О.В. Підготовка майбутнього вчителя до впровадження комп'ютерних технологій // Освіта Донбасу. – 2006. – №3–4. С. 116–117.
11. Тасенко О.В. Використання комп'ютерів у викладанні хімії та біології [Текст] / О.В. Тасенко // Комп'ютер у школі та сім'ї. – 2007. – №1. – С.16–18.
12. Затворний О., Затворна І. Використання комп'ютерних моделей на уроках хімії // Біологія та хімія в школі. – 2004. – №4. – С. 33–37.
13. Титаренко Н. Використання комп'ютерних навчальних програм з хімії // Біологія та хімія в школі. – 2004. – №1. – С. 9–12.
14. Воронина Т.П., Кашицин В.П., Молчанова О.П. Образование в эпоху новых информационных технологий (методологические аспекты). – М., 1995.