

Общий подход к решению задач по определению структуры органических соединений с помощью комбинаций спектроскопических и спектрометрических методов

1. Определите молекулярную массу соединения из масс-спектра по положению пика с самым большим массовым числом (молекулярный ион). Если молекулярная масса нечетная, сделайте предположение о наличии нечетного количества атомов азота в молекуле. По массовым числам осколков определите наличие бензильной, ацетильной, третбутильной метильной и других групп. Используя изотопный рисунок молекулярного иона, определите количество атомов углерода, галогенов, серы в соединении.
2. Определите относительное число неэквивалентных атомов водорода из ^1H ЯМР-спектра по высоте интегральной кривой. Исходя из значения химического сдвига (положение сигнала на шкале химических сдвигов) атома водорода сделайте заключение о близости гетероатома к нему. По значениям констант ССВ и мультиплетности сигналов сделайте вывод о порядке соединения углеводородных радикалов между собой. По отсутствию некоторых сигналов в ПМР-спектре, записанном для раствора вещества в дейтронных растворителях, установите число обменивающихся протонов.
3. Определите общее число атомов углерода из ^{13}C ЯМР-спектра, число четвертичных атомов углерода, метильных, метиленовых и метиновых групп из эксперимента ЯМР DEPT 135.
4. Определите молекулярную формулу вещества из данных элементного анализа или масс-спектра высокого разрешения. Установите степень ненасыщенности (число кратных связей и/или циклов).
5. Определите молярное поглощение из электронного спектра (в УФ или видимой спектральной области). По положению максимума поглощения сделайте вывод о цвете вещества и о наличии системы сопряжения, ароматической системы.
6. Из ИК-спектра по положению полос колебаний определите наличие кратных связей, функциональных групп: карбонильной, гидроксильной, нитрильной и других.
7. Сделайте заключение о строении молекулы вещества.