Министерство образования и науки Российской Федерации

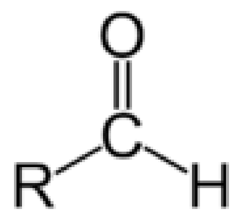
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
«Национальный исследовательский
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

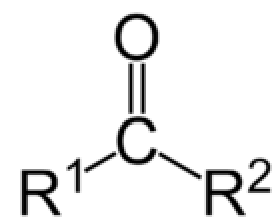
Идентификация альдегидов и кетонов

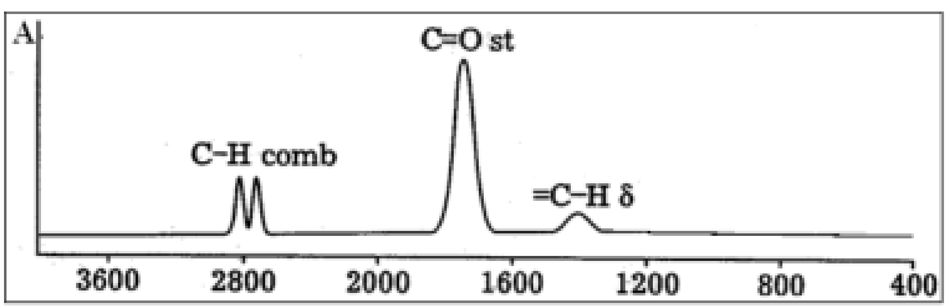
Выполнила: студентка группы 4Д00
Кузнецова Валерия

Альдегиды - класс органических соединений, содержащих карбонильную группу (C=O) с одним алкильным или арильным заместителем.

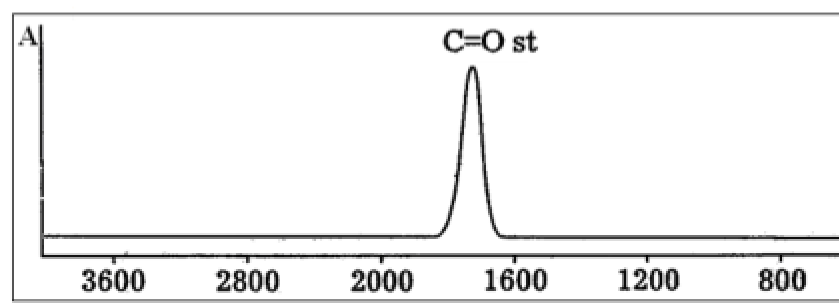
Кетоны - класс органических соединений, содержащих карбонильную группу (C=O) с двумя алкильными или арильными заместителями.







Альдегиды



Кетоны

Характеристические полосы поглощения.

Альдегиды.			
Предельные алифатические $-CH_2-CHO$	1740-1720 (5,75-5,81)	с.	Участие в образовании водородных связей заметно понижает частоту ν_{CO} (например, в случае внутримолекулярной Н-связи в салициловом альдегиде до 1666 см$^{-1}$).
α,β – непредельные $C=C-CHO$	1705-1685 (5,78-5,93)	с.	
Сопряженные полиеновые $C=C-C=C-$	1680-1660 (5,95-6,02)	с.	
Ароматичес-кие	1715-1695 (5,83-5,90)	с.	
Другие колебания	2880-2650 (3,47-3,77) 975-780 (10,26-12,82)	ν_{CH} (сл. или ср.) δ_{CH} (ср.)	Возможно появление двух полос. Полоса средней интенсивности около 2720 см$^{-1}$ в сочетании с полосой поглощения $C=O$ является надежным указанием на альдегидную группу.

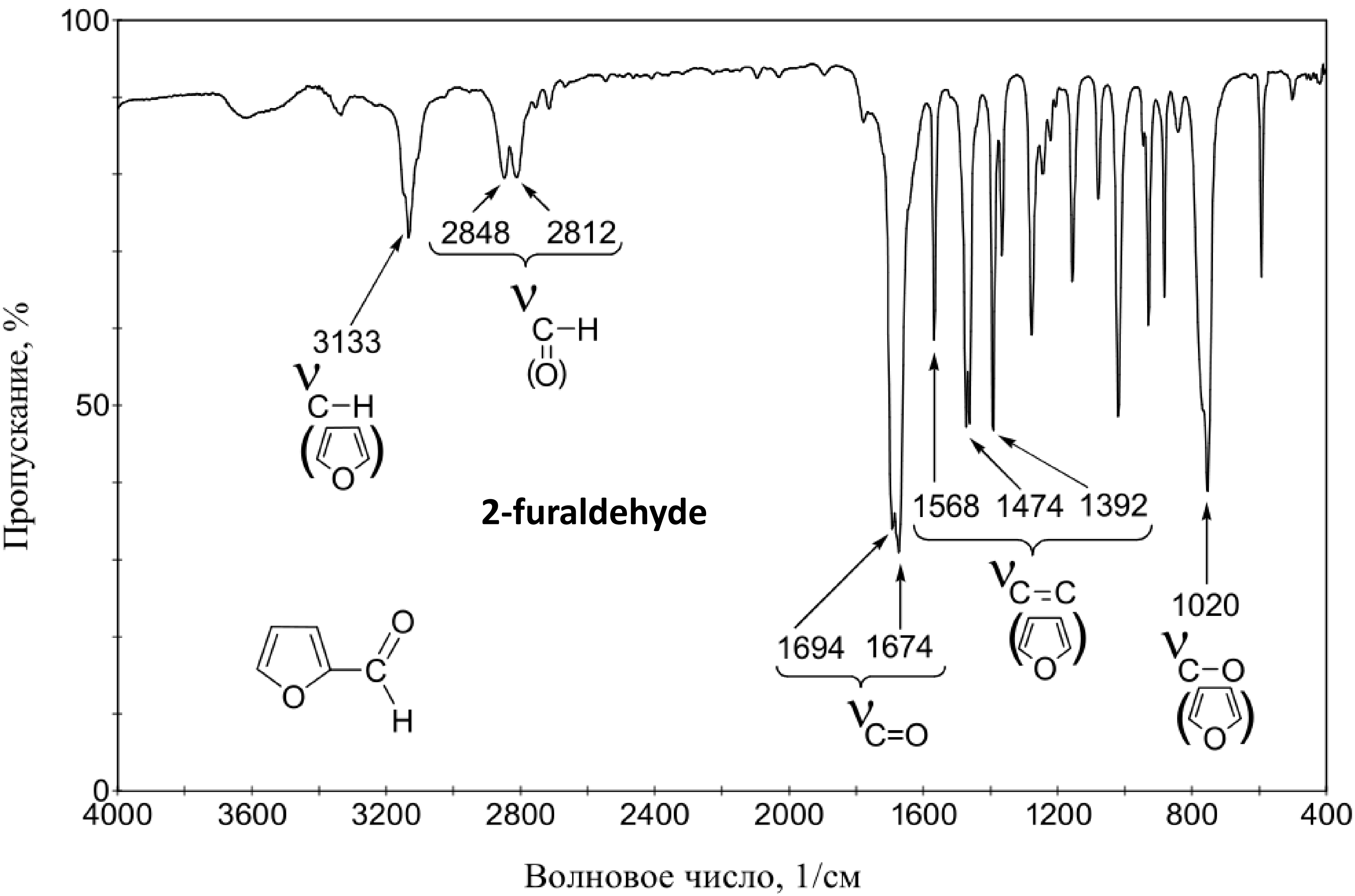
<table>
<tr><th colspan="4">Кетоны. Валентные колебания $\nu_{C=O}$ в кетонах.</th></tr>
<tr><td>Алифатические
$-H_2C-CO-CH_2-$</td><td>1725-1700 (5,80-5,88)</td><td>с.</td><td rowspan="12">На положение полосы $n_{C=O}$ влияют следующие факторы:
1) физическое состояние пробы;
2) растворитель(в случае растворов);
3) электронные эффекты ближайших заместителей;
4) сопряжение с кратными связями и ароматическими кольцами;
5) наличие меж- и внутримолекулярных Н – связей;
6) кинематические эффекты заместителей и напряжение циклов в случае циклических структур.</td></tr>
<tr><td>Циклобутанон</td><td>1780-1760 (5,62-5,68)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>Циклопентано
н</td><td>1750-1740 (5,71-5,75)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>Циклогексанон</td><td>1720-1700 (5,81-5,88)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>α,β–
непредельные
C=C-CO</td><td>1695-1660 (5,90-6,02)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>C=C-CO-C=C</td><td>1670-1660 (5,99-6,02)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>Арилалкилке-
тоны
Ar-CO-Alk</td><td>1700-1680 (5,88-5,92)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>Диарилкетоны
Ar-CO-Ак</td><td>1670-1660 (5,99-6,02)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>α–
Галогензамещ.
CX-CO</td><td>1745-1725 (5,72-5,80)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>α,α’-
Дигалогенза-
мещённые
CX-CO-CX</td><td>1765-1745 (5,67-5,72)</td><td>с.</td></tr>
<tr><td>α-Дикетоны
-CO-CO-</td><td>1730-1710 (5,78-5,85)</td><td>с.</td></tr>
</table>

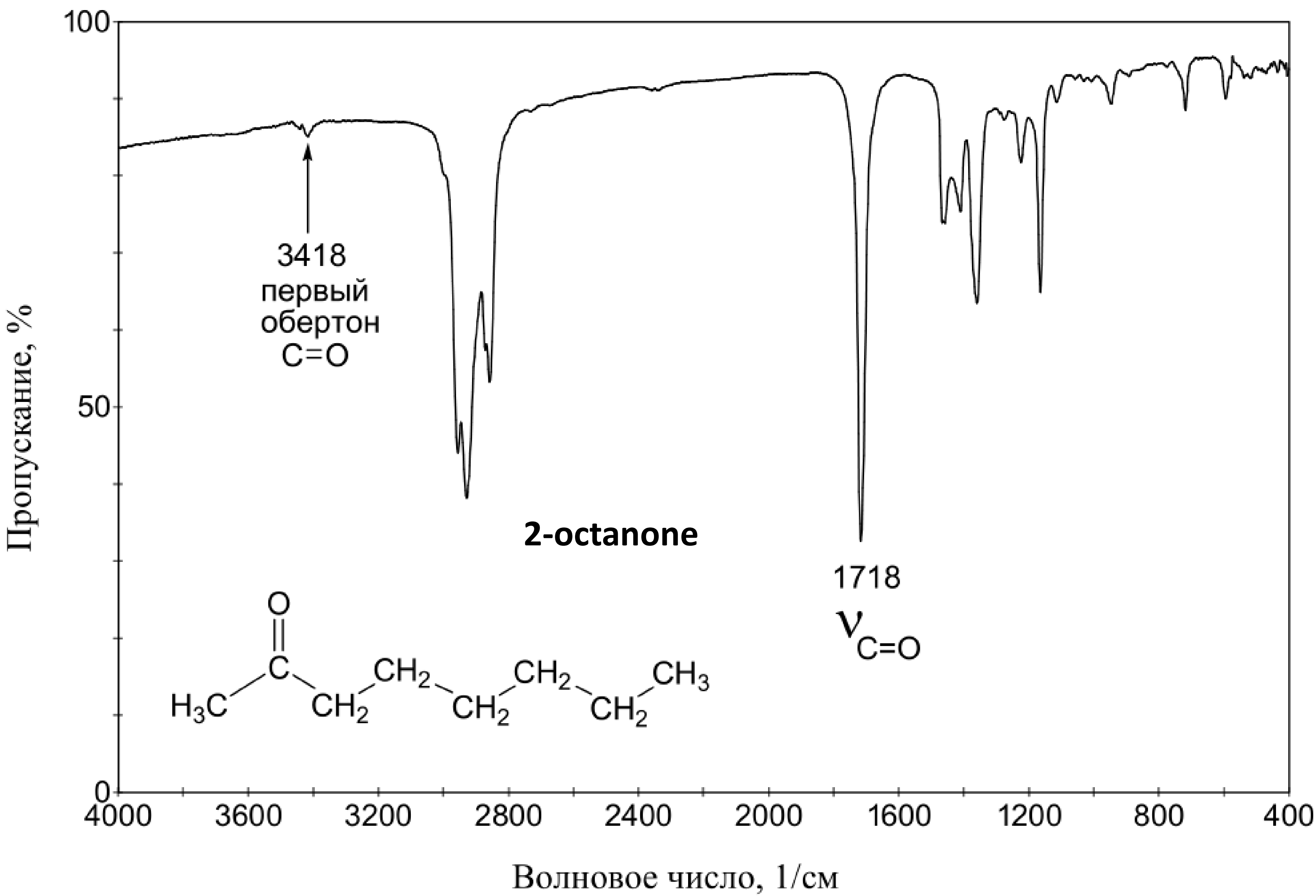
β-Дикетоны Енольная форма -CO-C=C-OH Кетонная форма CO-CH_2-CO	1640-1535 (6,10-6,52) ~1720 (~5,81)	с. с.	В области 3200-2700 $см^{-1}$ появляется широкая полоса ν_{OH}. В кетонной форме при компланарном расположении C=O групп в результате колебательного взаимодействия наблюдаются 2 полосы.
-CO-CH_2-CH_2-CO-	1725-1705 (5,80-5,87)	с.	

Другие колебания в ИК спектрах кетонов.			
CH_3-CO-	1360-1355 (7,35-7,38)	с.	δ_{CH3}
-CH_2-CO-	1435-1405 (6,97-7,12)	с.	δ_{CH2}
Все кетоны	3550-3200 (2,82-3,13)	сл.	Обертон ν_{CO}, полоса может быть ошибочно отнесена к колебаниям O-H группы.

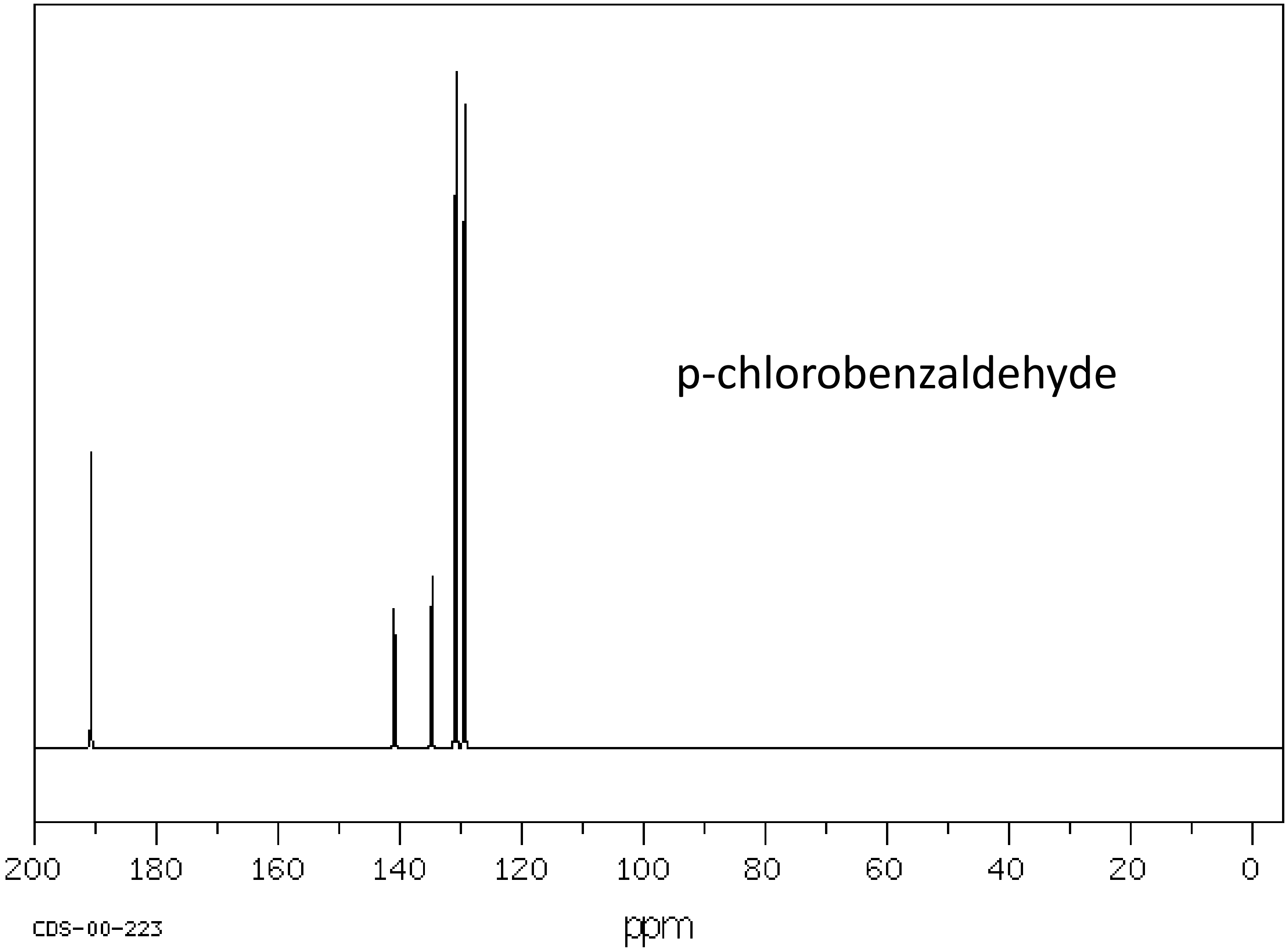
Частоты валентных колебаний карбонильной группы в некоторых соединениях.

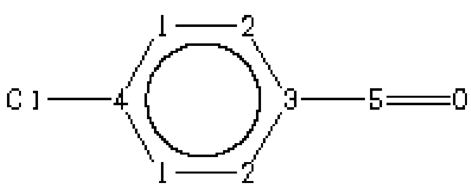
X	ЧАСТОТЫ, $СМ^{-1}$	X	ЧАСТОТЫ, $СМ^{-1}$
Cl	1815-1785	NH_2	1695-1650
F	~1870	S	1720-1690
Br	1812	SiR_3	~1620
OR	1750-1735		


100
50
0
4000
3600
3200
2800
2400
2000
1600
1200
800
400
Пропускание, %
Волновое число, 1/см
3133
ν_{C-H}
2848
2812
ν_{C-H} (O)
2-furaldehyde
1694
1674
$\nu_{C=O}$
1568
1474
1392
$\nu_{C=C}$
1020
ν_{C-O}
O
C
H

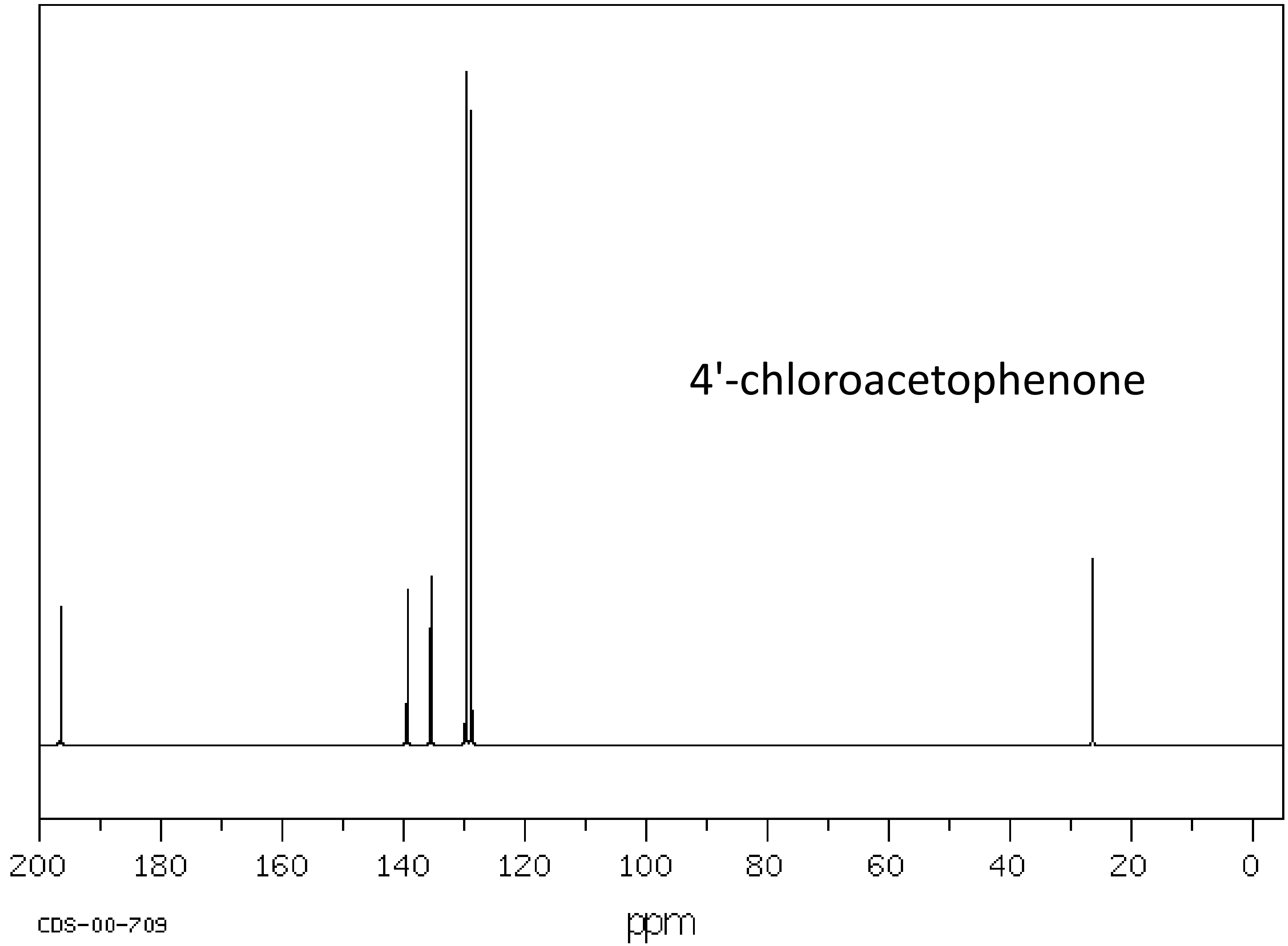

100
50
0
Пропускание, %
3418
первый
обертон
C=O
2-octanone
1718
$\nu_{C=O}$
O
C
H_3C
CH_2
CH_2
CH_2
CH_2
CH_2
CH_3
4000
3600
3200
2800
2400
2000
1600
1200
800
400
Волновое число, 1/см

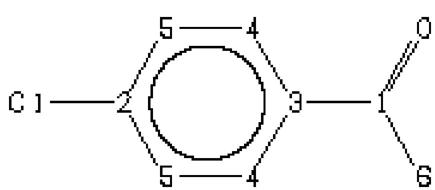
Спектроскопия ядерного магнитного резонанса ядер 13 С .





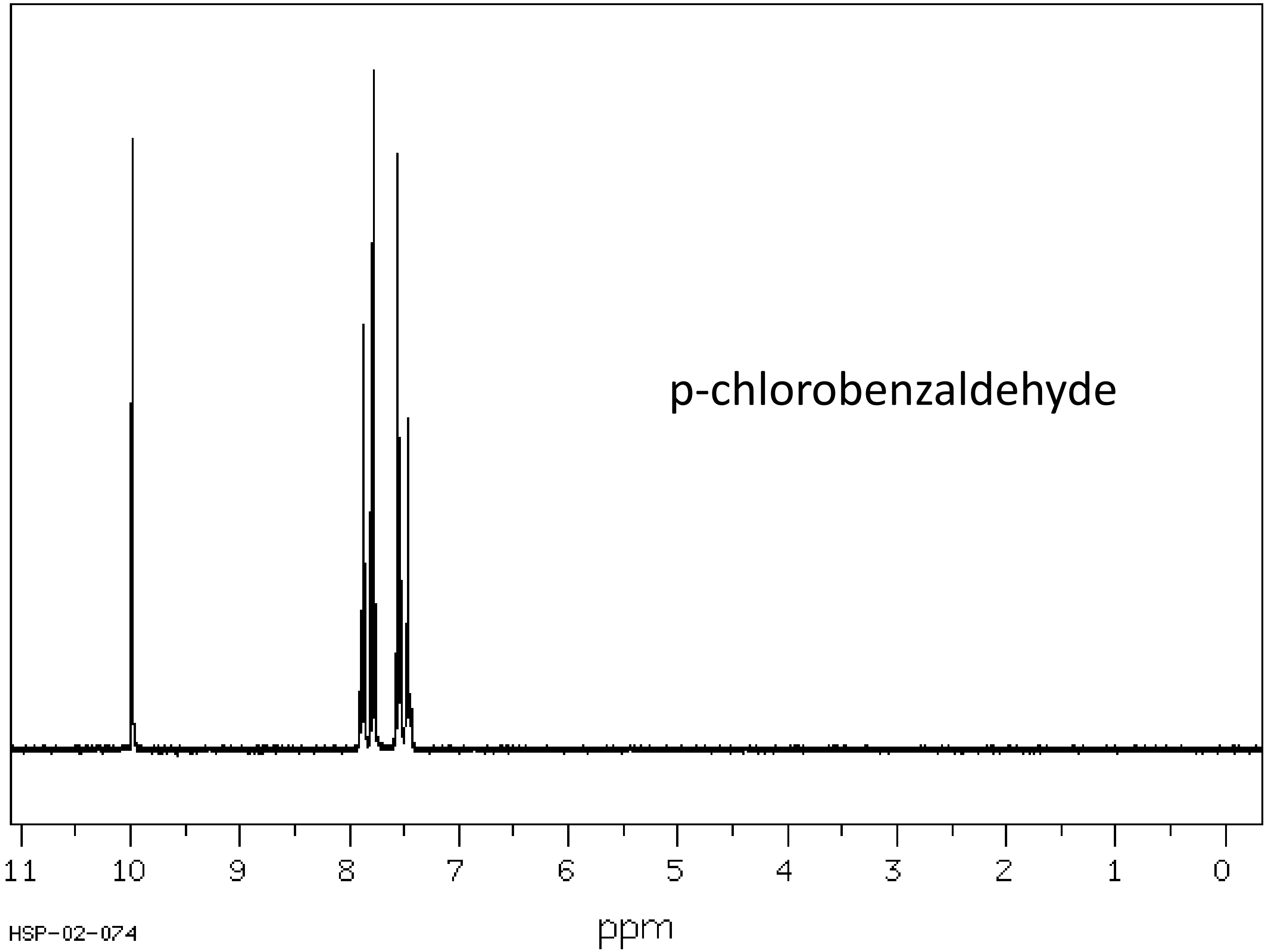
ppm	Int.	Assign.
190.77	435	5
140.91	206	4
134.82	254	3
130.89	1000	2
129.45	952	1

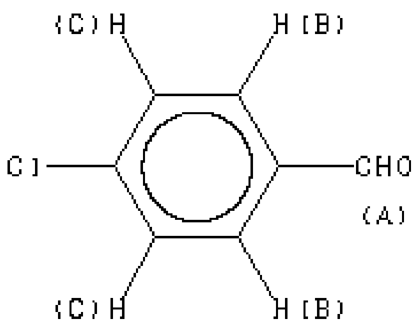




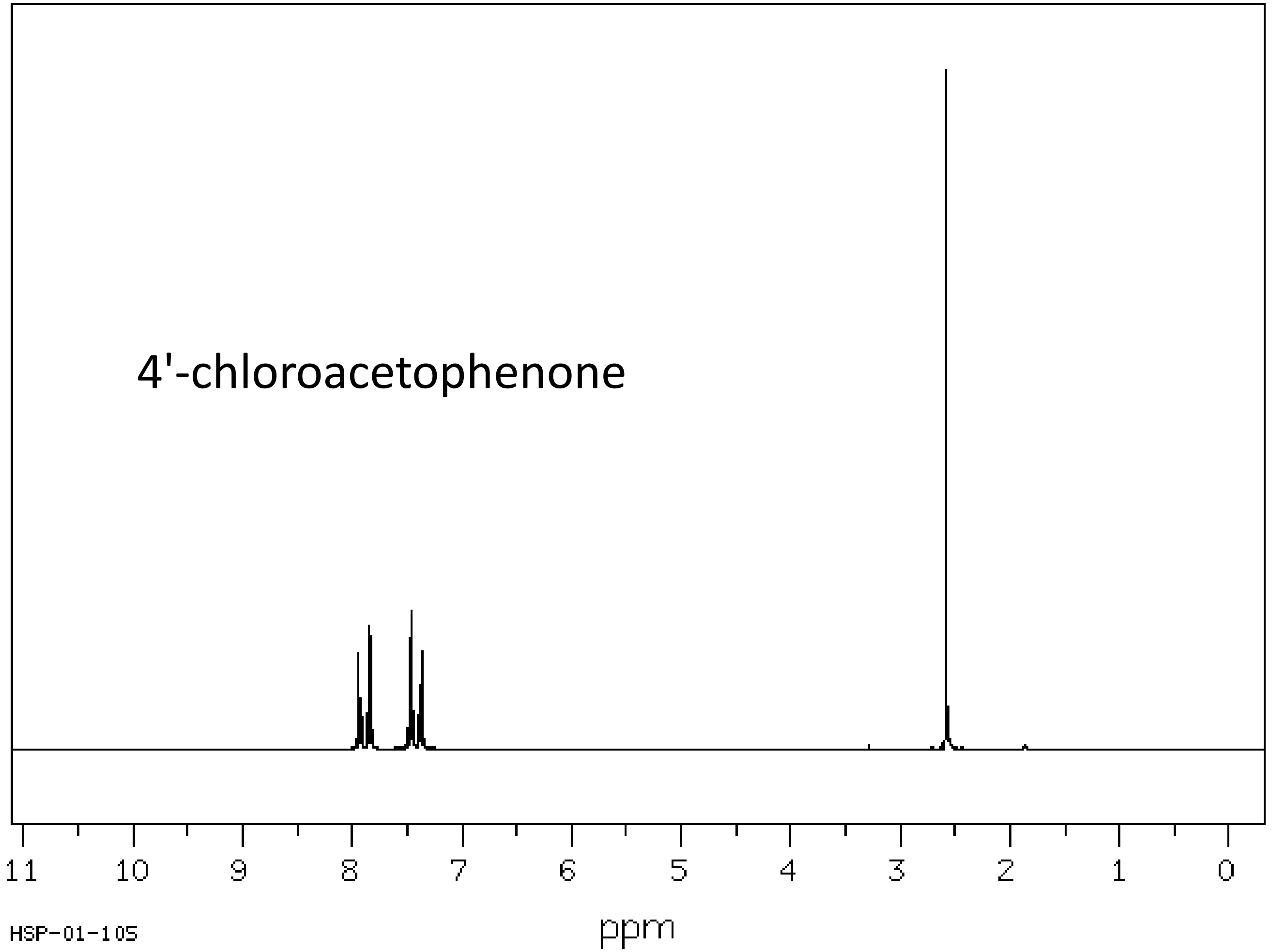
ppm	Int.	Assign.
196.51	204	1
139.44	229	2
135.54	249	3
129.72	1000	4
128.84	940	5
26.40	274	6

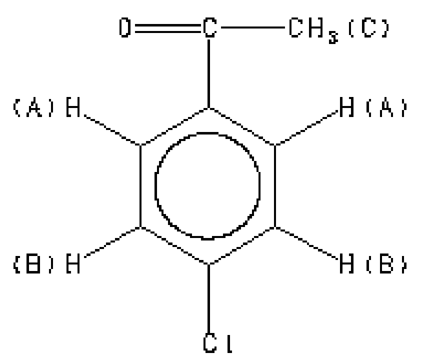
Спектроскопия ядерного магнитного резонансах на ядрах 1H .





Assign.	Shift(ppm)
A	9.99
B	7.82
C	7.52





Assign.	Shift(ppm)
A	7.88
B	7.43
C	2.579

Источники :

1. http://portal.tpu.ru:7777/SHARED/e/EAK/Education/Tab5
2. Инфракрасная спектроскопия органических и природных соединений/ А. В. Волков [и др.] – СПб. : Изд-во СПбГЛТА , 2007, -29 с.
3. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений. МГУ имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра органической химии. –М. 2012, -55с.
4. http://sdbs.riodb.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi
5. http://www.sigmaaldrich.com/chemistry/chemistry-products.html?TablePage=16350755
6. М.В.Волькенштейн, Л.А.Грибов, М.А.Ельяшевич, Б.И.Степанов, Колебания молекул, “Наука”, М., 1972;
7. . Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений / Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. − М.: Мир, 2006. − 439с.
8. . Казицина А.А.. Куплетская Н.Б. Применение ИК-, УФ- и ЯМР-мектроскопии в органической химии/ Казицина А.А., Куплетская Н.Б. − М.: Высшая школа, 1971. − 263с.

Спасибо за внимание