

Введение в специализацию.

Некоторые вопросы применения спектроскопических методов в органической химии.

ИК спектроскопия (лекция 2).



МГУ имени М.В.Ломоносова,
Химический факультет, кафедра органической химии. Тарасевич Б.Н.

Инфракрасная спектроскопия

**Введение в функциональный анализ
органических соединений**

Литература

1. Р.Сильверстейн, Ф.Вебстер, Д.Кимл, Спектрометрическая идентификация органических соединений, М., «Мир», «БИНОМ Лаборатория знаний», 2011.
2. А. Смит. Прикладная ИК спектроскопия, М., «Мир», 1982.
3. Э.Преч, Ф.Бюльманн, К.Аффольтер. Определение строения органических соединений, М., «Мир», «БИНОМ лаборатория знаний», 2006.
4. Л.Беллами. Инфракрасные спектры сложных молекул, М., 1963.
5. Л.Беллами. Новые данные по ИК спектрам сложных молекул, М., «Мир» 1971.
6. К.Накамото. ИК спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений, М, «Мир», 1991.
7. <https://sdfs.db.aist.go.jp>
8. В Play Маркет можно найти приложения по ИК, FTIR и др.

Колебательные спектры многоатомных молекул.

Происхождение колебательных спектров,
нормальные колебания многоатомных молекул, как систем точечных масс.

Природа ИК и КР спектров, правила отбора.

ИК спектроскопия (изменение **дипольного момента** связи в процессе колебания) и спектроскопия комбинационного рассеяния света (КР или Раман спектроскопия - изменение **поляризуемости связи** в процессе колебания), как взаимодополнительные методы колебательной спектроскопии.

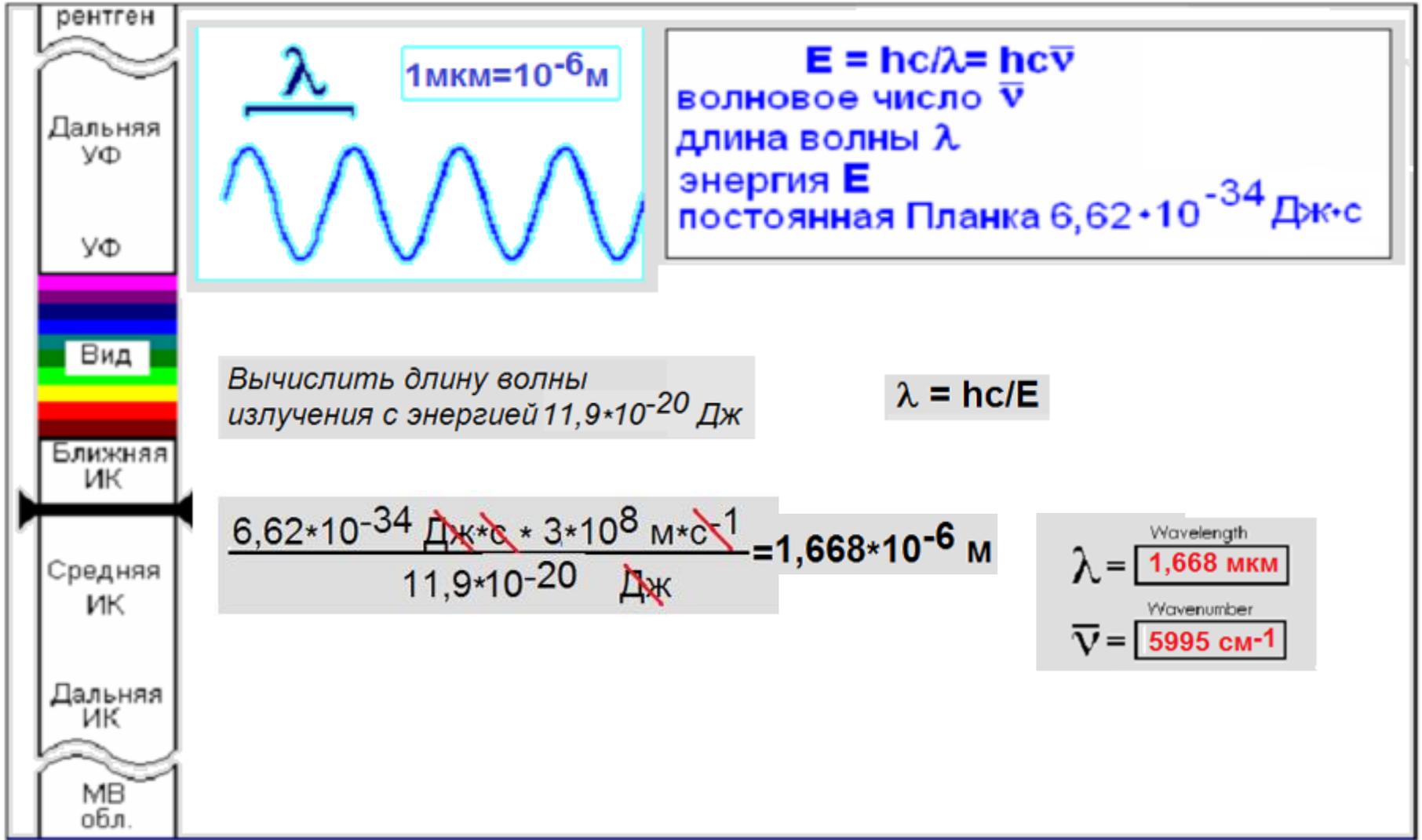
ИК-спектроскопия - метод исследования веществ, основанный на поглощении инфракрасного (ИК) излучения исследуемым веществом. Колебательные движения, происходящие в молекулах в пределах основного электронного уровня, проявляются в ИК области спектра, поэтому эти спектры называют ***колебательными***.

К колебательным спектрам относятся и спектры комбинационного рассеяния (КР или Раман).

Колебательные спектры.

Области ИК спектра		Длины волн (мкм), волновые числа (см ⁻¹)	Частоты, Гц (приближённо)
ИК ближняя	Область обертонов и составных частот	0,75 - 2,5 мкм 13333,3 – 4000 см⁻¹	10¹⁴
Средняя	Колебания атомного остова	2,5 – 25 мкм 4000 – 400 см⁻¹	10¹⁴ - 10¹²
Дальняя и микроволновая	Вращения молекул	25 – 1000 мкм 400 – 10 см⁻¹	10¹⁰ - 10¹²

Шкала электромагнитных волн.



0,000 000

Элементы теории колебательных спектров (напоминание).

. Колебательными спектрами обладают не все молекулы (O_2 или N_2 не имеют ИК спектра), а только те, у которых при колебании происходит изменение дипольного момента ($H-Cl$, H_2O , $C=O$ и др. IR tu).

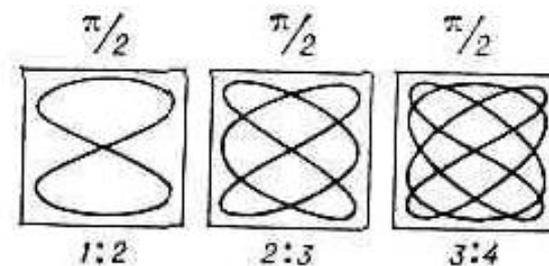
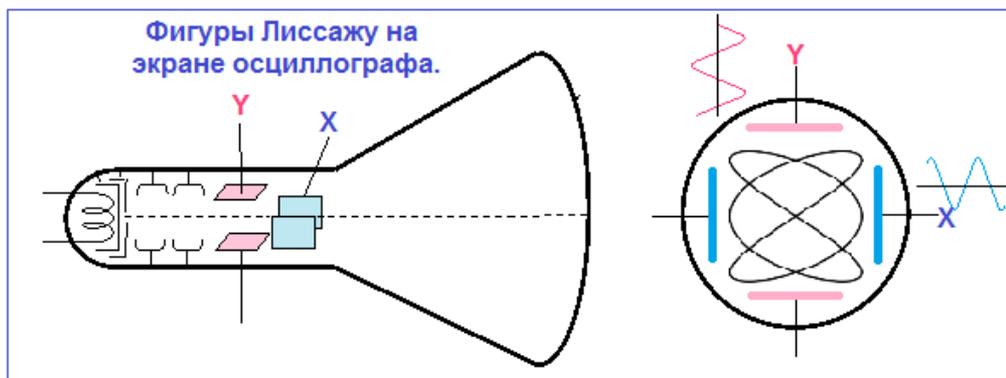
В ИК спектрах **многоатомных молекул** проявляются те колебания, которые происходят с изменением дипольного момента.

Нормальное колебание - такое колебание, при котором все атомы принимающие в нём участие, колеблются в фазе, с одной частотой и одновременно проходят через положение равновесия

Число нормальных колебаний N для n -атомных молекул (в основном электронном состоянии).

Для линейной молекулы $N = 3n - 5$

Для нелинейной молекулы $N = 3n - 6$

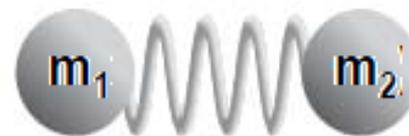


Нормальное колебание - такое колебание, при котором все атомы принимающие в нём участие, колеблются в фазе, с одной частотой и одновременно проходят через положение равновесия.

Нормальные колебания молекулы воды. (IR Tutor. Normal Modes)

Выражение для частоты колебаний двух масс в приближении гармонического осциллятора. Валентное колебание двухатомной молекулы.

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$



где, $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ = приведённая масса

c = скорость света

k = силовая постоянная связи

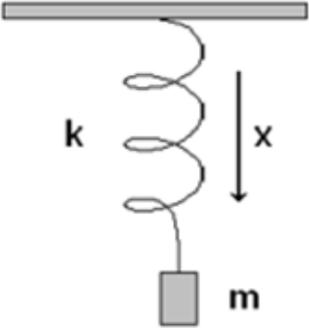
ν = частота колебаний

$\bar{\nu}$ = волновое число

$$1/\lambda = \bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 m_2}}$$

Решение уравнений колебательного движения в случаях простого гармонического осциллятора и многоатомной молекулы.

Для гармонического осциллятора


$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}x$$
$$x = A \cos(2\pi\nu + b)$$
$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Число нормальных колебаний N для

n -атомных молекул (в основном электронном состоянии).

Для линейной молекулы $N = 3n - 5$ Для нелинейной молекулы $N = 3n - 6$

Для многоатомной молекулы требуется решение векового уравнения в форме Лагранжа

$$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{U}\mathbf{L} = \lambda\mathbf{L}, \quad |\mathbf{T}^{-1}\mathbf{U} - \lambda\mathbf{E}| = 0$$

где \mathbf{L} – матрица амплитуд колебаний, \mathbf{E} – единичная матрица,

$\lambda = \nu^2$ – квадраты частот колебаний.

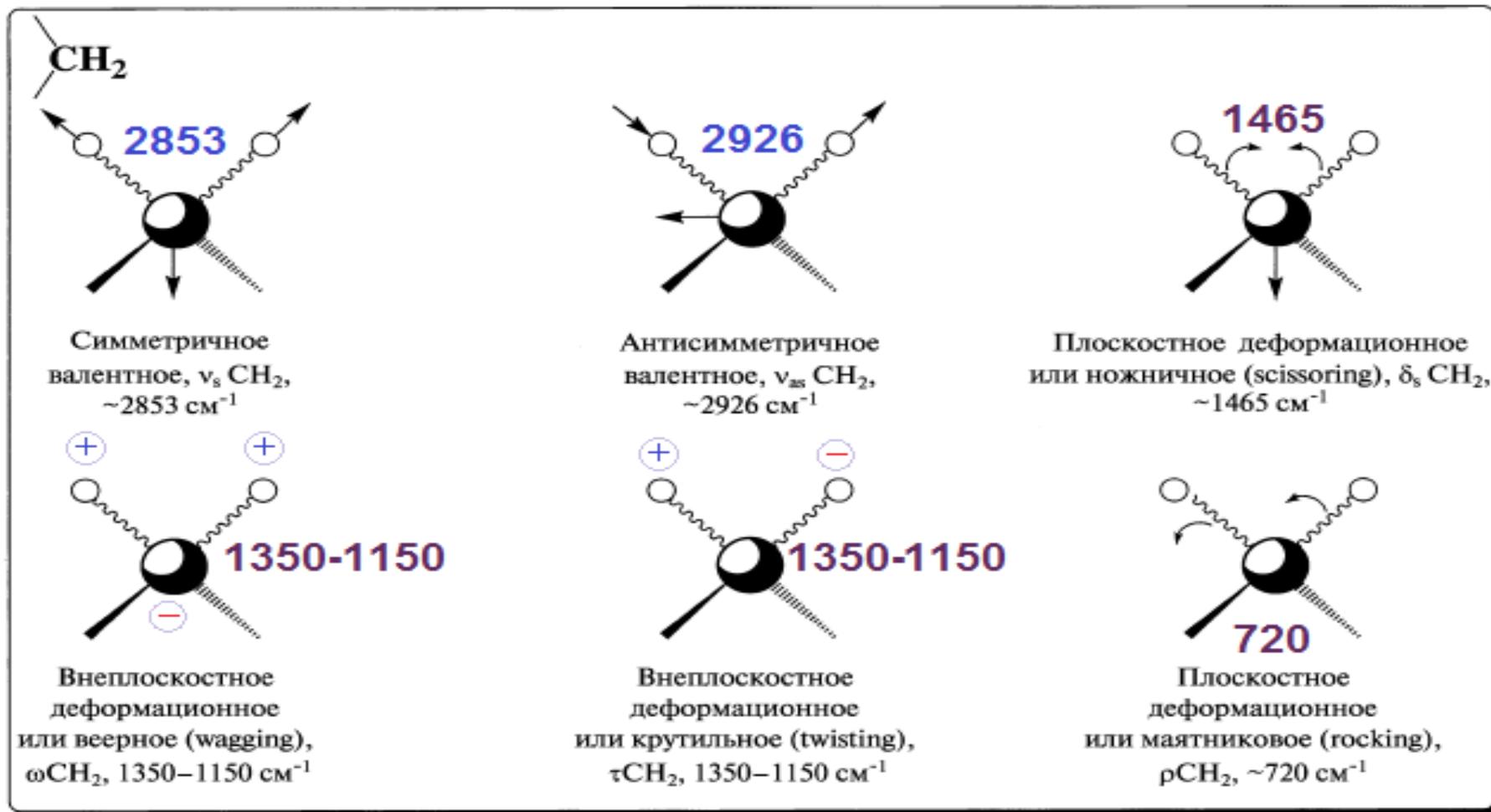
В результате решения системы этих уравнений получаются частоты и формы нормальных колебаний.

Функциональный анализ органических соединений по ИК спектрам основан на концепции характеристических колебаний.

Колебание *характеристично* для данной группы по частоте, если одно из нормальных колебаний молекулы по частоте *приблизённо* совпадает с одним из нормальных колебаний данной группы как *свободной молекулы*. Такое определение несколько условно, но на практике иногда себя оправдывает.

Формы колебаний группы CH_2 (в знаки + и – означают направления движения атомов перпендикулярно плоскости страницы.).

Валентные ν (stretch) и деформационные δ (bending) колебания. (Центр тяжести молекулы остаётся неподвижным). (**IRTUTOR гексан C_6H_{14} , $n=20$, $3n-6=54$**)



Средняя область подразделяется на **область «отпечатков пальцев»** (600-1500 см⁻¹) и **область характеристических полос** (1500-4000 см⁻¹).

В области **«отпечатков пальцев»** лежат полосы поглощения деформационных колебаний скелета органической молекулы, содержащей связи С-С, С-О, С-N (для этой области не характерны колебания, принадлежащие отдельным связям).

По ИК спектрам в области «отпечатков пальцев» можно идентифицировать функциональные группы и сами органические соединения.

Интервалы волновых чисел некоторых валентных колебаний.

увеличение энергии колебаний связи, шкала волновых чисел, см⁻¹

4000 см ⁻¹		3000 см ⁻¹		2000 см ⁻¹		1500 см ⁻¹		1000 см ⁻¹	
область характеристических полос						область "отпечатков пальцев"			
связи с водородом		тройные связи и кумулены		двойные связи		одинарные связи C-C			
O-H		C≡C		C=C		C-O			
N-H		C≡N		C=O		C-F			
C-H		C=C=C		Ar		C-Cl			

Комбинационное рассеяние света - Раман спектроскопия.

Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

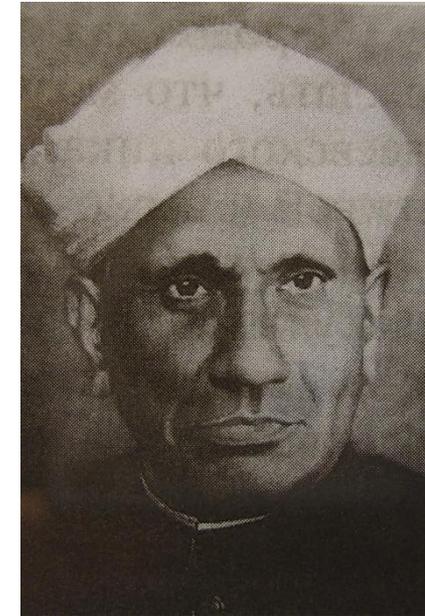
Комбинационное рассеяние (КР) света – Раман спектроскопия.



Леонид Исаакович Мандельштам



Григорий Самуилович Ландсберг



- Ч.В.Раман

**Мандельштам и
Ландсберг, МГУ.
Кристаллы кварца.
Наблюдали 21 февраля
1928 г. Сообщение, 27
апреля 1928 г.**



Рис. 2. Спектр света, рассеянного в кварце (двукратное увеличение): 1 — спектр сравнения; 2 и 3 — спектры рассеянного света, снятые при 20 и 210°C (экспозиция 105 ч); α — красные сателлиты, β — фиолетовые сателлиты [8, 40].

**Раман и Кришнан
(Калькутта).
Наблюдали 28 февраля 1928
г. в жидком бензоле.
Нобелевская премия 1930 г.**

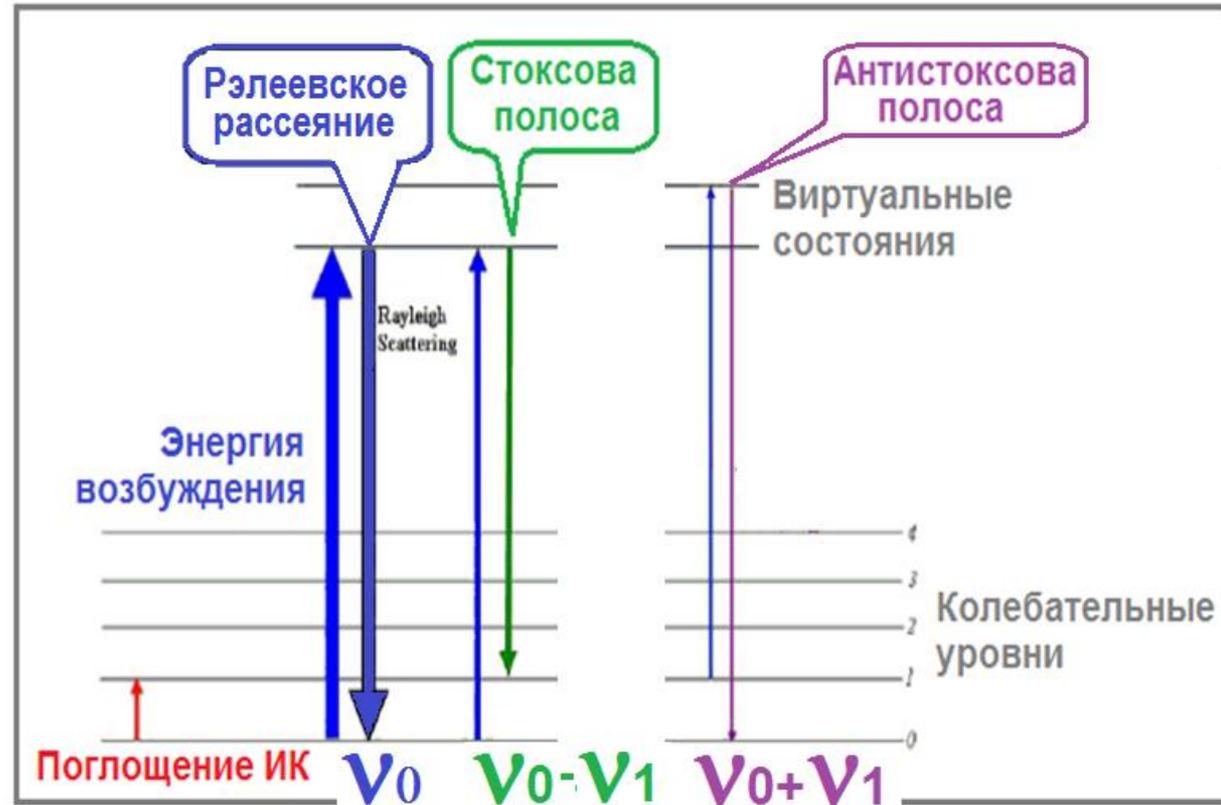
Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

Комбинационное рассеяние света - Раман спектроскопия.

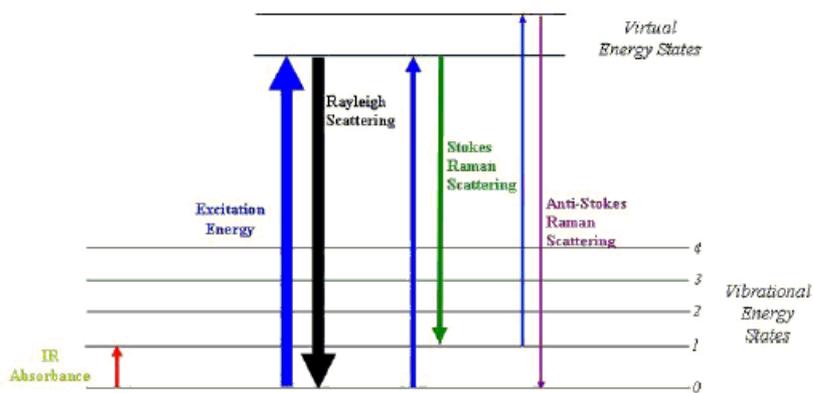
В спектрах КР действуют другие, чем в ИК правила отбора. Колебание активно в ИК, если в его процессе меняется дипольный момент. Колебание активно в КР, если в его процессе меняется поляризуемость.

Правило альтернативного запрета. Если молекула имеет центр симметрии, то колебания, активные в ИК, неактивны в КР и наоборот.

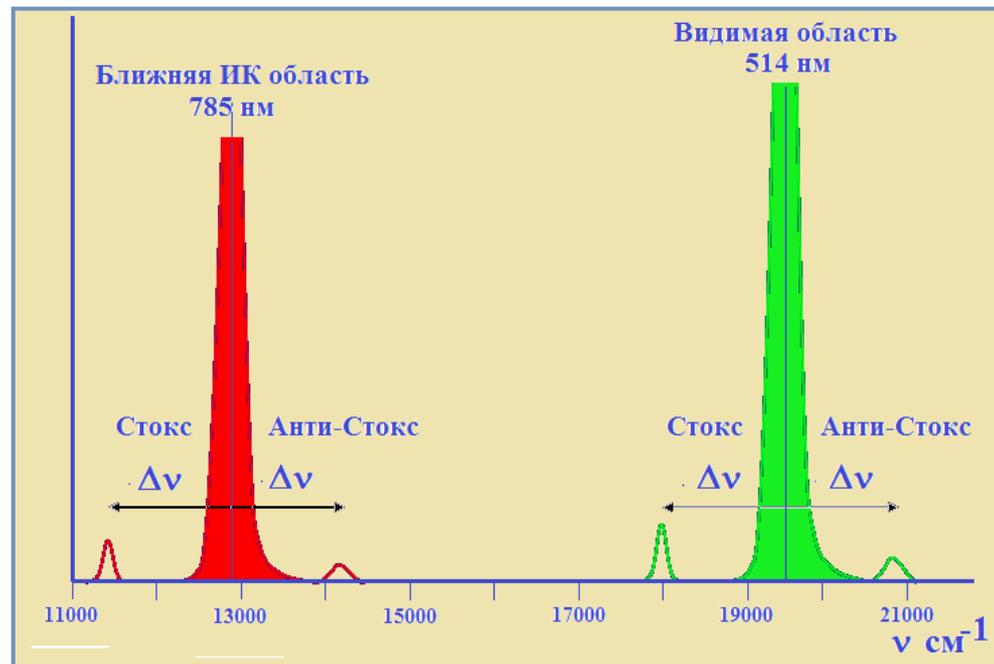
Для получения полной информации о частотах колебаний молекулы необходимо использовать и ИК и КР спектры, как взаимно дополняющие друг друга.



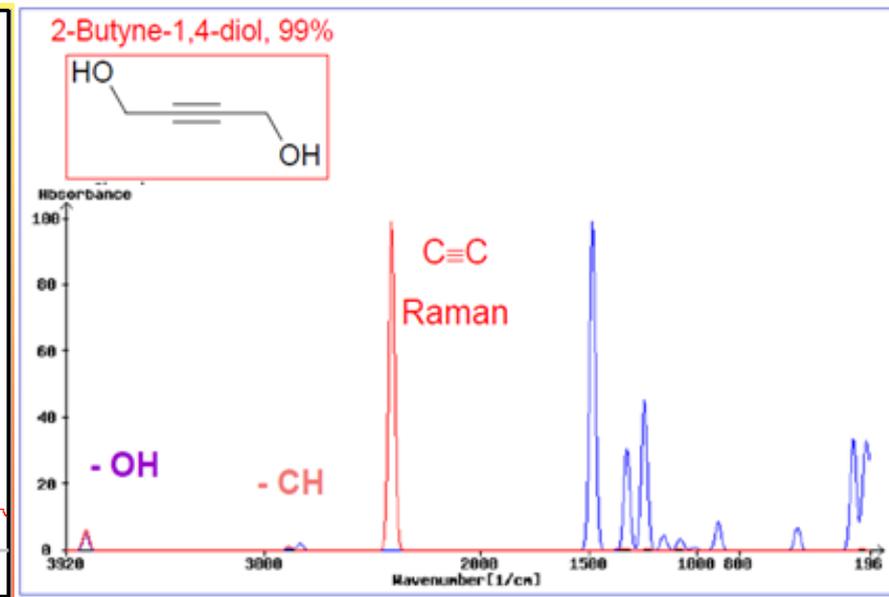
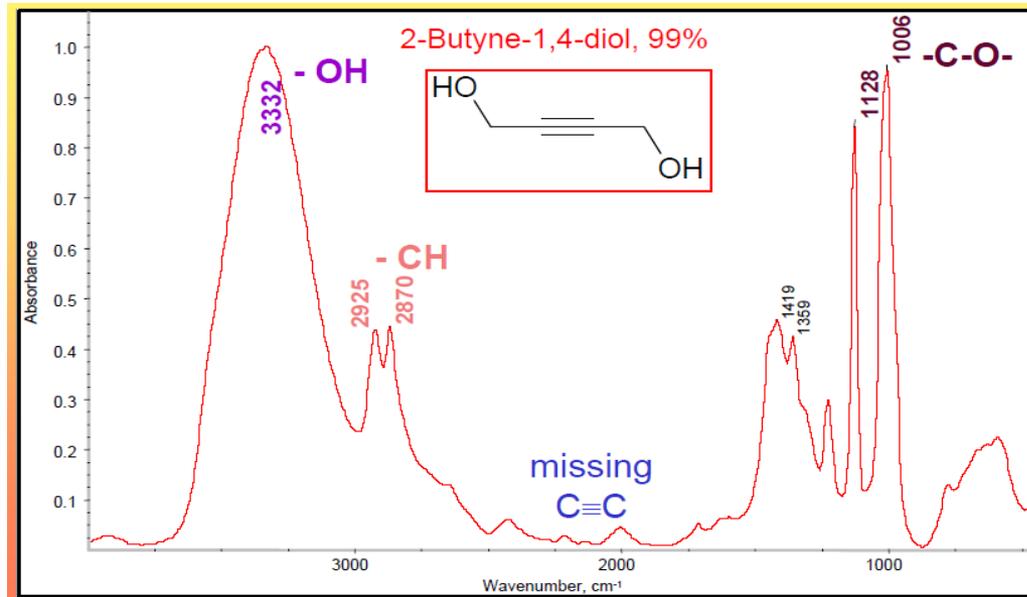
Комбинационное рассеяние света - Раман спектроскопия.



Energy level diagram showing the states involved in Raman signal. The line thickness is roughly proportional to the signal strength from the different transitions.



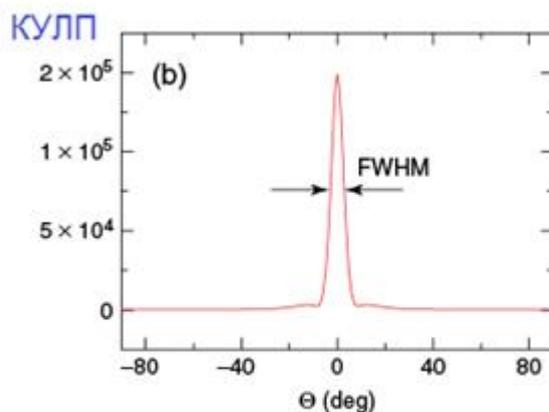
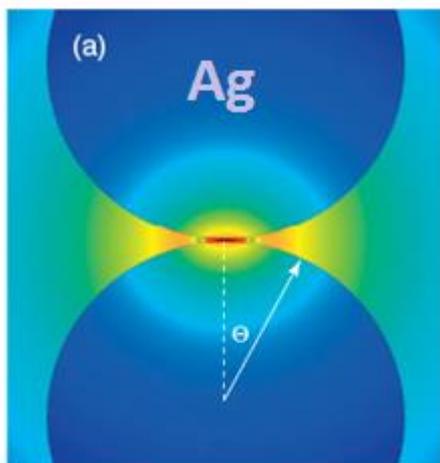
В ИК спектре симметричного диола валентные колебания тройной связи не наблюдаются, а спектре КР проявляются, то же относится к валентным колебаниям ОН.



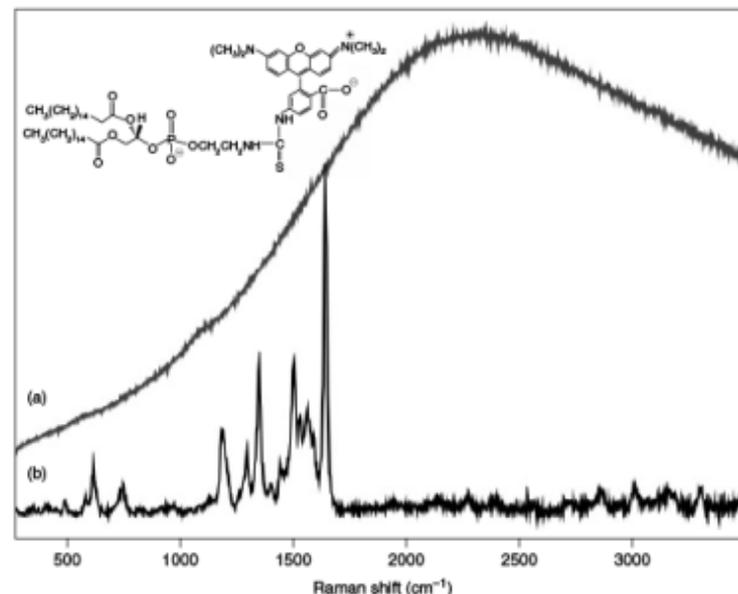
Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS), гигантское КР или КР, усиленное поверхностью (КРУП)

«монетных металлов». Увеличение интенсивности линий КР 10^3 - 10^{10} раз.

Fleischmann M., Hendra P.J., McQuillan A.J. (1974). Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. Chem. Phys. Lett. 26, 2–5.



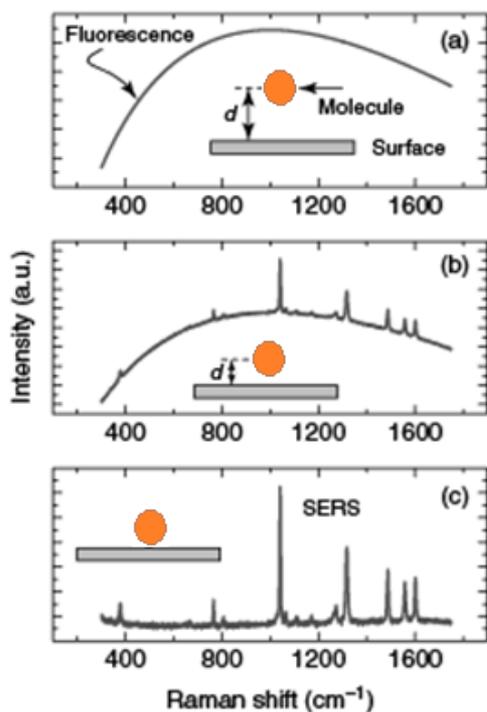
Пространственное распределение коэффициента усиления локального поля между частицами серебра радиусом около 50 нм. Горячие точки (плазмонные резонансы) сконцентрированы в узком зазоре.



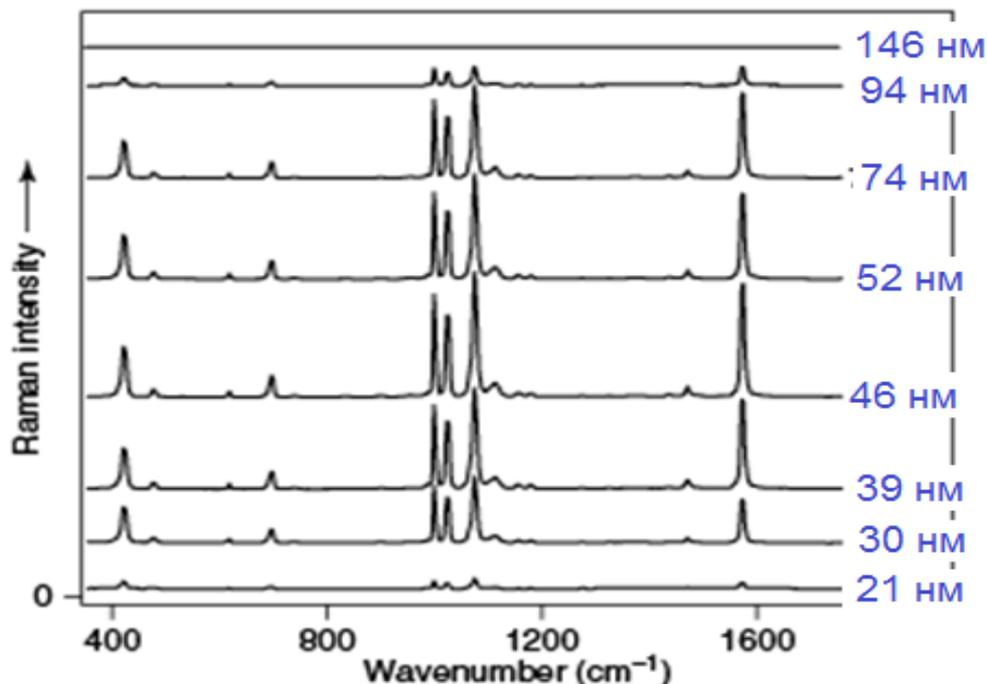
Сравнение спектров флуоресценции (a) и SERS фосфолипида, меченого родаминовым красителем (b), нанесённого на островковую плёнку серебра. Чувствительность 10 молекул/мкм² (с.95).

Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS), гигантское КР или КР, усиленное поверхностью (КРУП).

Fleischmann M., Hendra P.J., McQuillan A.J. (1974). Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. Chem. Phys. Lett. 26, 2–5.



Схематичное изображение спектров флуоресценции (a) и SERS (c) для различных расстояний молекулы от поверхности металла.



Спектры SERS тиофенола, полученные на коллоидных агрегатах наночастиц золота, диаметры которых указаны. Самое большое усиление обеспечивают частицы диаметром 46 нм.

Литература:

«Поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия (SERS): аналитические, биофизические и медицинские приложения». Ред. С.Шлюкера, Техносфера, М., 2017.

Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS), гигантское КР или КР, усиленное поверхностью (КРУП).

Fleischmann M., Hendra P.J., McQuillan A.J. (1974). Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. Chem. Phys. Lett. 26, 2–5.

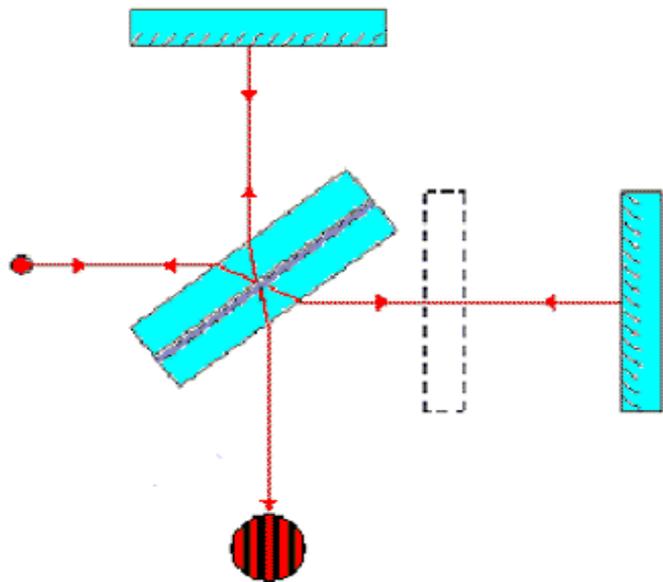
Техника эксперимента и пробоподготовка.

Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

ИК спектроскопия с преобразованием Фурье. Интерферометр Майкельсона.



ИК-спектроскопия с преобразованием Фурье



Интенсивность монохроматического излучения, попадающего на приемник :



$$I(x) = B(\nu) \cos(2\pi x \nu)$$

где $B(\nu)$ – интенсивность света, попадающего на приёмник, ν в см^{-1}
 x – смещение зеркала в см

В случае источника полихроматического излучения, на приём попадают все частоты, которые образуют интерферограмму:

$$I(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} B(\nu) \cos(2\pi x \nu) d\nu$$

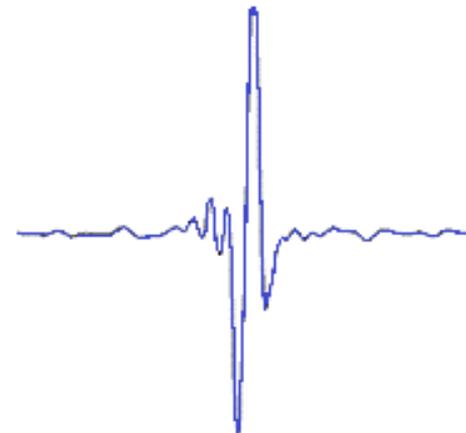
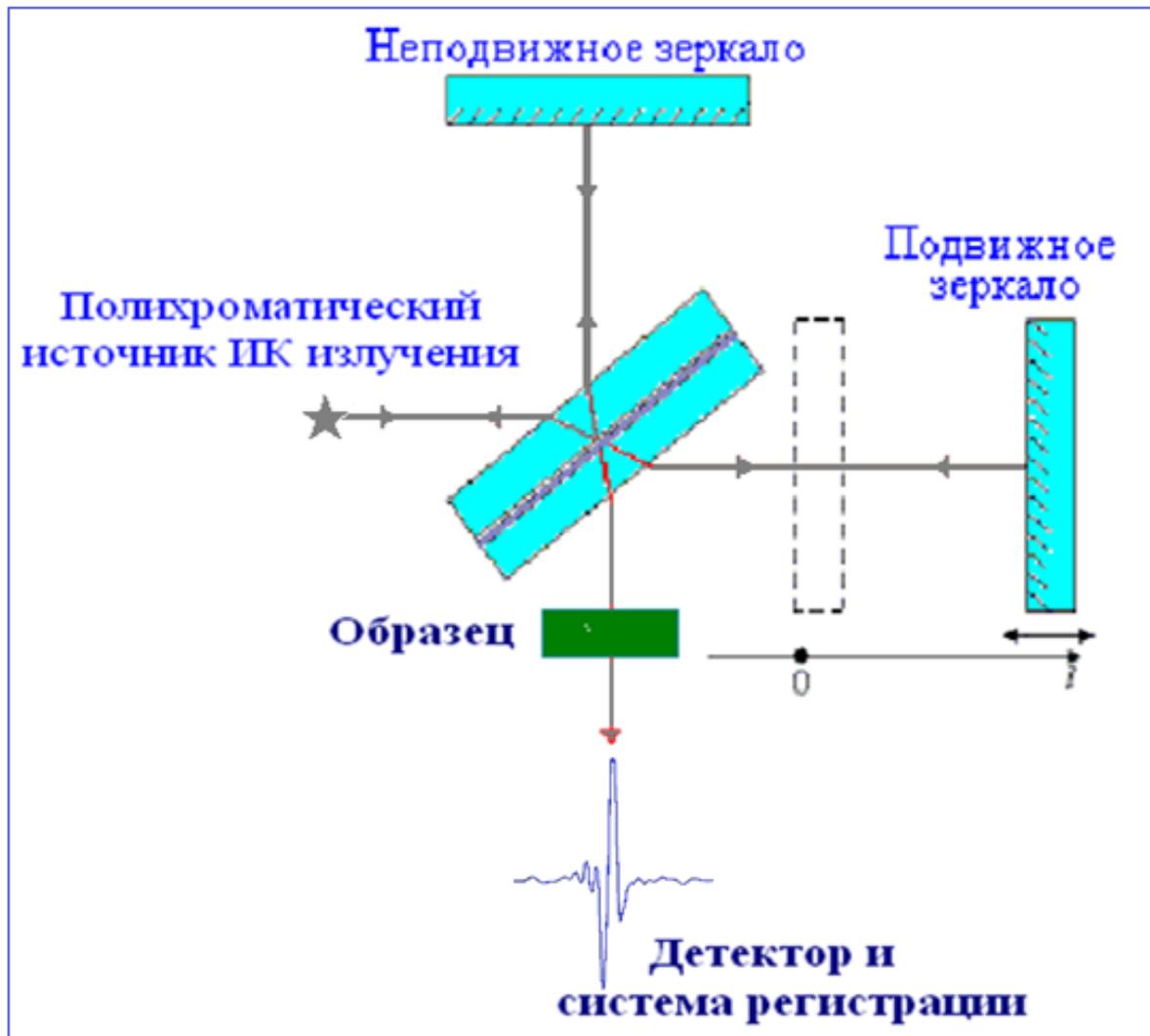
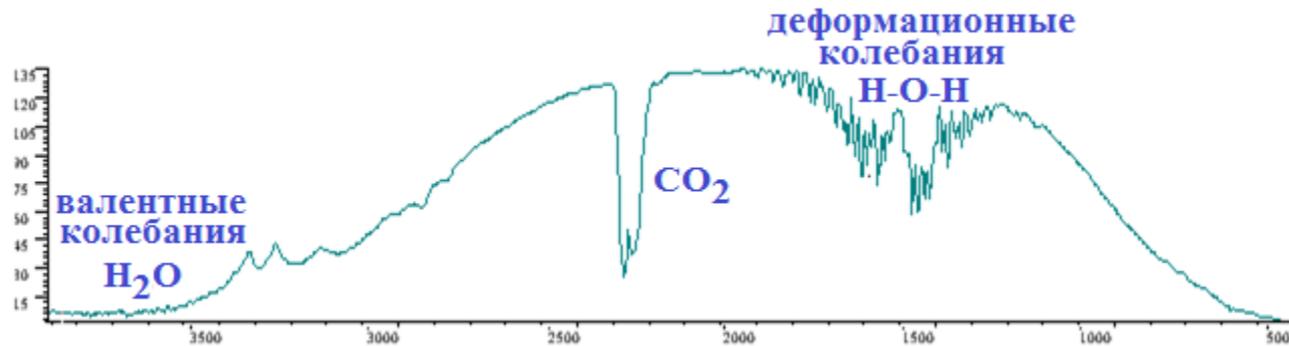


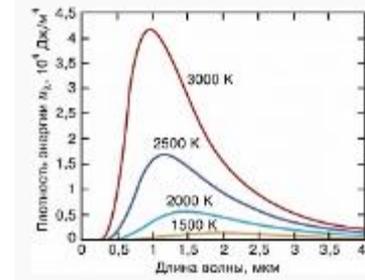
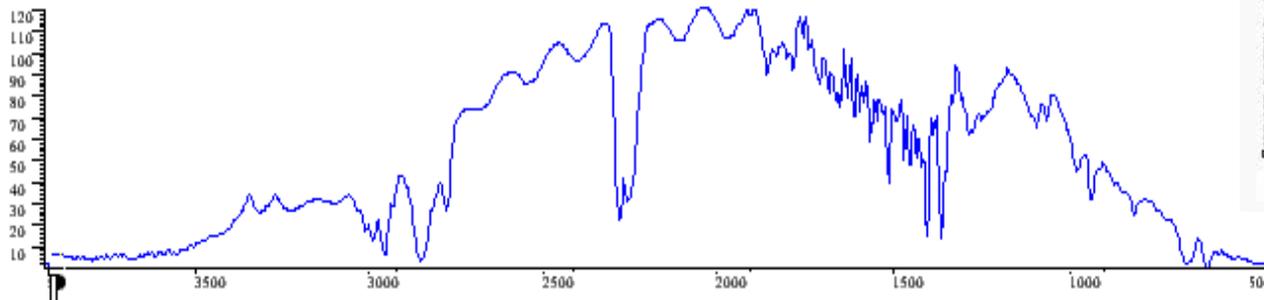
Схема ИК спектрометра с преобразованием Фурье. (однолучевой)



Регистрация спектра источника излучения – спектр сравнения (B_{ref} *reference*)

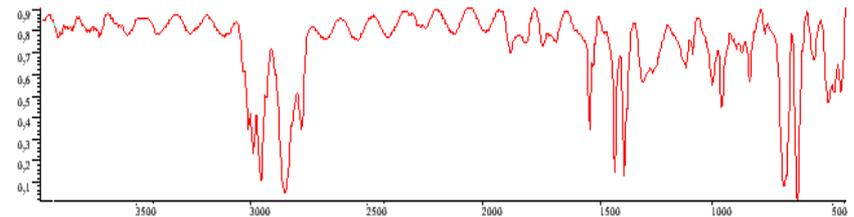


Регистрация спектра пробы (B_{sample}).



Для получения спектра пропускания пробы:

$$T = \frac{B_{sample}(\nu)}{B_{ref}(\nu)}$$



Преимущества спектрометрии с преобразованием Фурье:

- 1. Многоканальность – более эффективное использование энергии ИК излучения, одновременная регистрация всего заданного спектрального диапазона.
- 2. Более высокая чувствительность, высокое отношение сигнал/шум, сокращение времени измерения.
- 3. Высокая разрешающая способность, высокая точность определения волновых чисел (*важно для спектров газов*).
- 4. Возможность регистрации слабых сигналов за счёт повторных сканирований и накопления сигналов (*адсорбция и др*).



Подготовка проб для регистрации ИК-спектров.

Объекты исследования ИК спектроскопии могут быть жидкими, твердыми, газообразными, могут быть как органическими, так и неорганическими.

Спектры *газов или паров* получают введением образца в вакуумные газовые кюветы.

Жидкости можно исследовать в чистом виде или *в растворах*. Жидкости помещают между двумя солевыми пластинками (NaCl, KBr, ZnSe или др.), получают пленку толщиной около 0,01 мм и меньше. Пластинки удерживаются в капиллярными силами. Необходимо от 1 до 10 мг пробы. Летучие жидкости исследуют в герметичных кюветах. Растворы помещают в кюветы толщиной от 0,1 – до 1 мм и более.

Твердые вещества исследуют в виде паст с вазелиновым маслом, прессованных таблеток с KBr или в виде осажденных плёнок или используют различные приёмы отражения излучения.

Держатель таблеток



Пресс



Пресс-форма



Кювета газовая

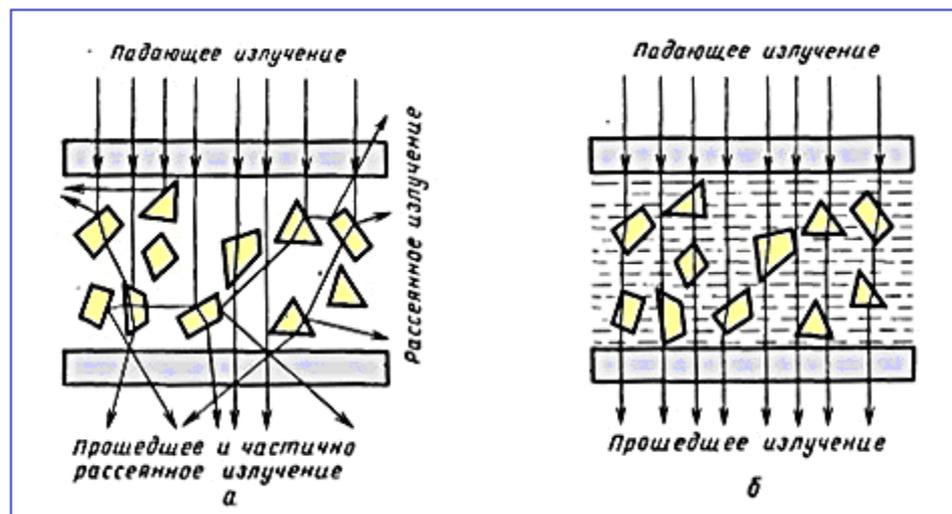
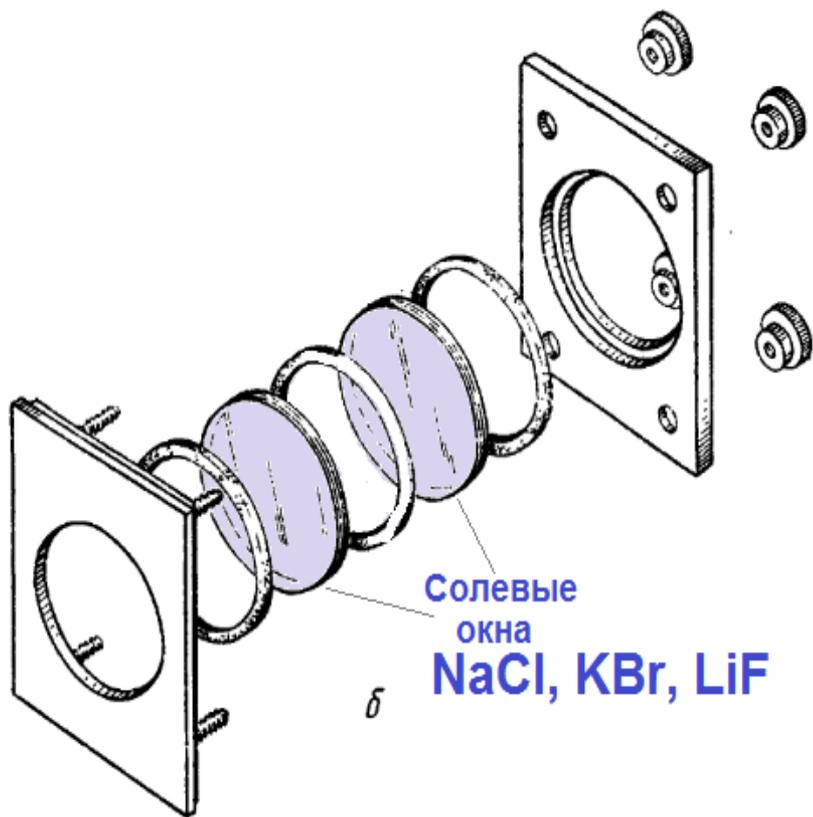


Кювета жидкостная разборная



Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

Методы подготовки проб. Жидкости, твёрдые вещества, пасты с вазелиновым маслом.



ИК спектрометры с преобразованием Фурье.



Nicolet IR100/200



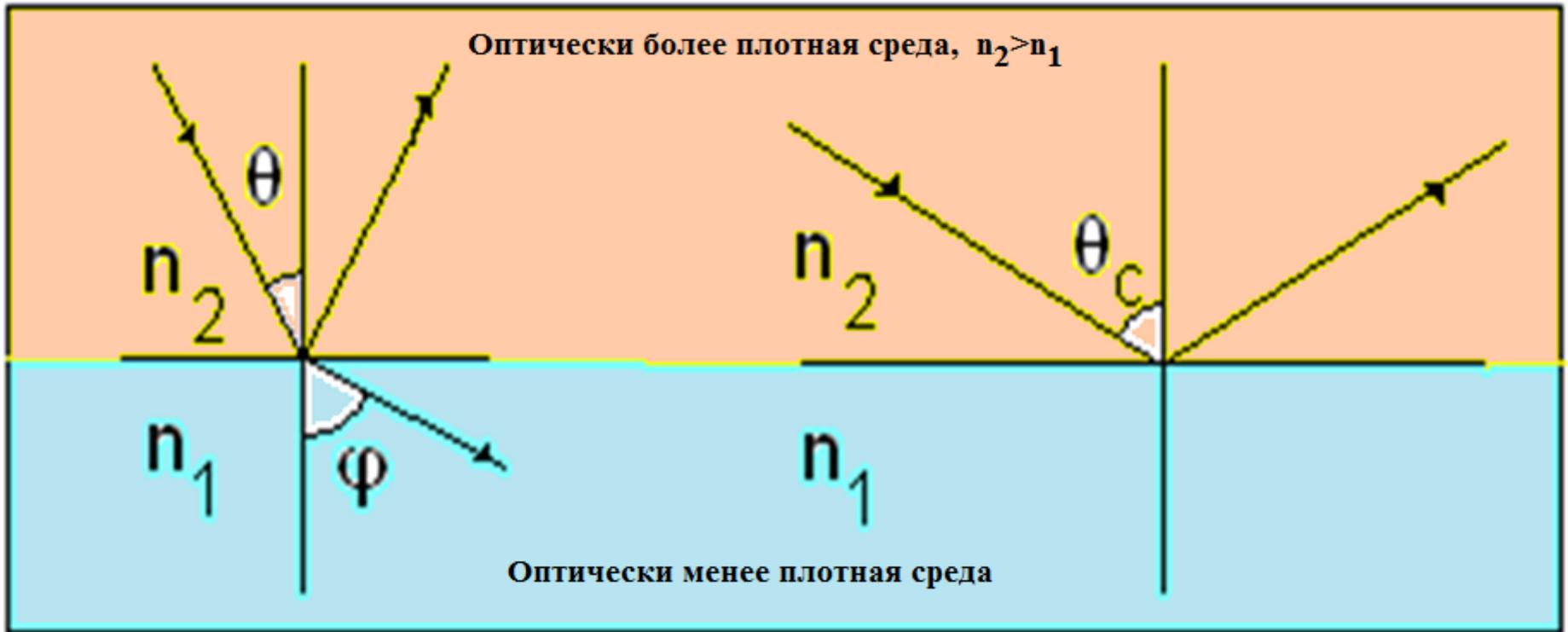
Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

ИК спектроскопия внутреннего отражения

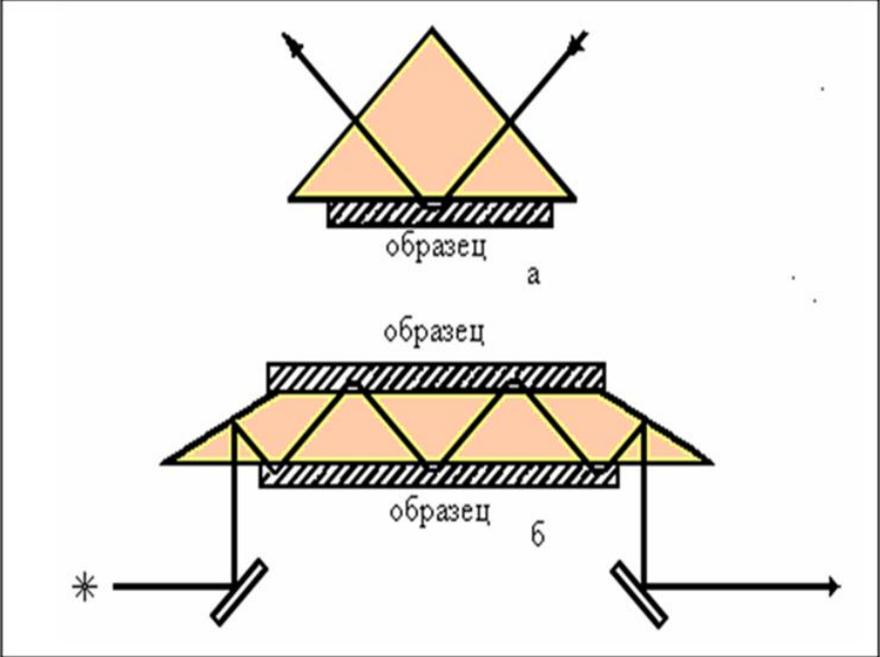
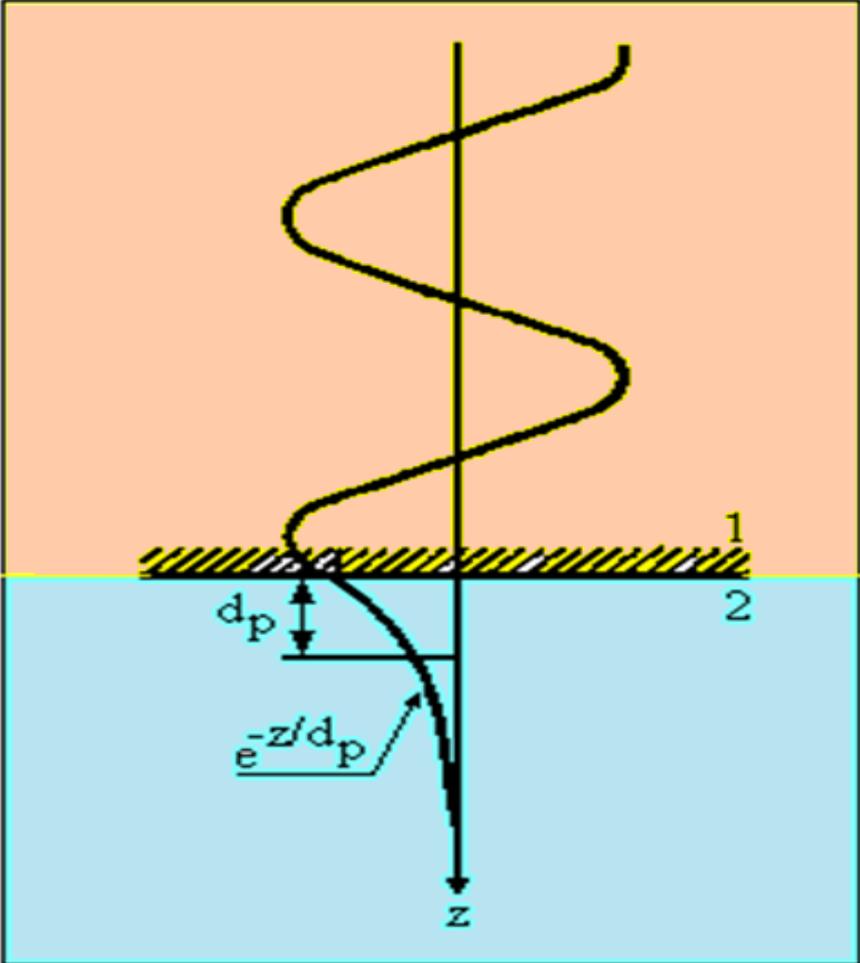
Нарушенное полное внутреннее отражение НПВО,
Многократное нарушенное полное внутреннее
отражение МНПВО,
Attenuated Total Reflection ATR.

Н.Харрик, Спектроскопия внутреннего отражения, М.,
«Мир», 1970.

Полное внутреннее отражение

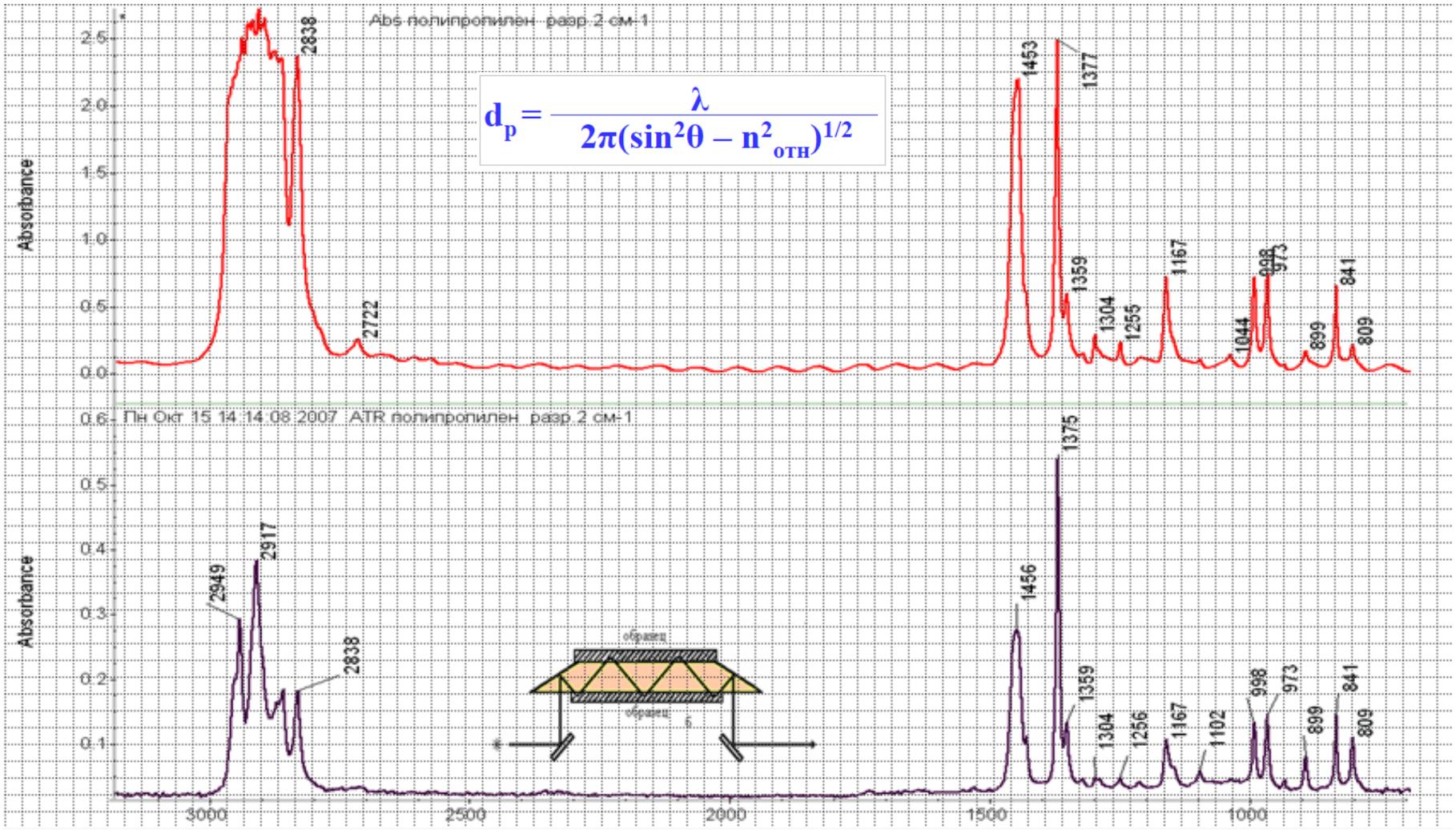


Проникновение излучения в оптически менее плотную среду при полном внутреннем отражении на глубину порядка длины волны.
 Схемы приставок НПВО и МНПВО (многократное НПВО).



$$d_p = \frac{\lambda}{2\pi(\sin^2\theta - n_{отн}^2)^{1/2}}$$

ИК спектры пропускания и МНПВО (ATR) полипропиленовой плёнки. В спектре внутреннего отражения интенсивность полос зависит от длины волны.

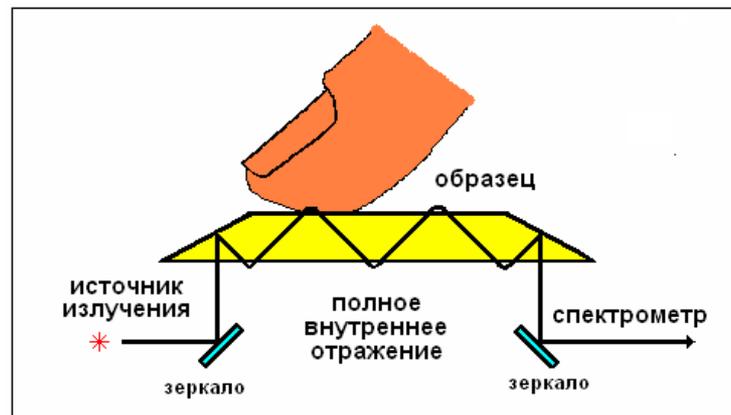


$$d_p = \frac{\lambda}{2\pi(\sin^2\theta - n^2_{отн})^{1/2}}$$

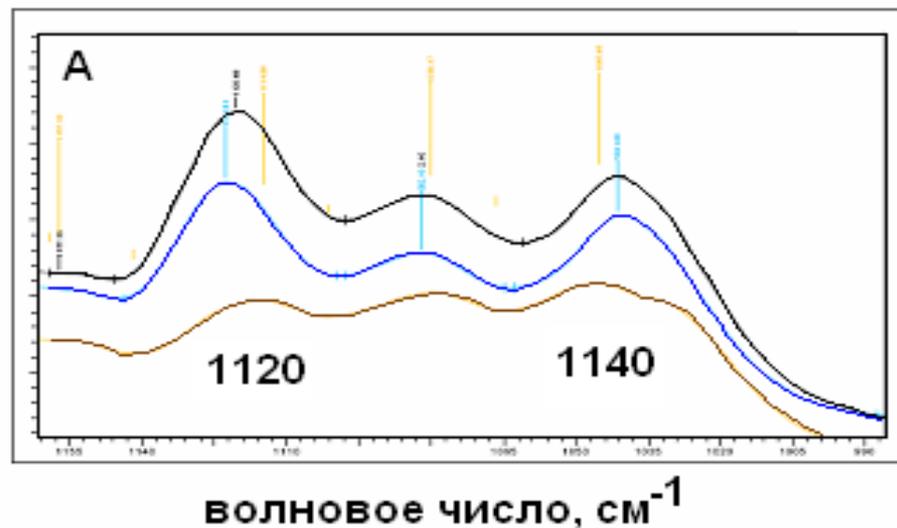
Мониторинг поверхности кожи – идентификация биомолекул *in vivo* методом ИК спектроскопии внутреннего отражения

(нарушенное полное внутреннее отражение НПВО - Attenuated Total Reflection ATR).

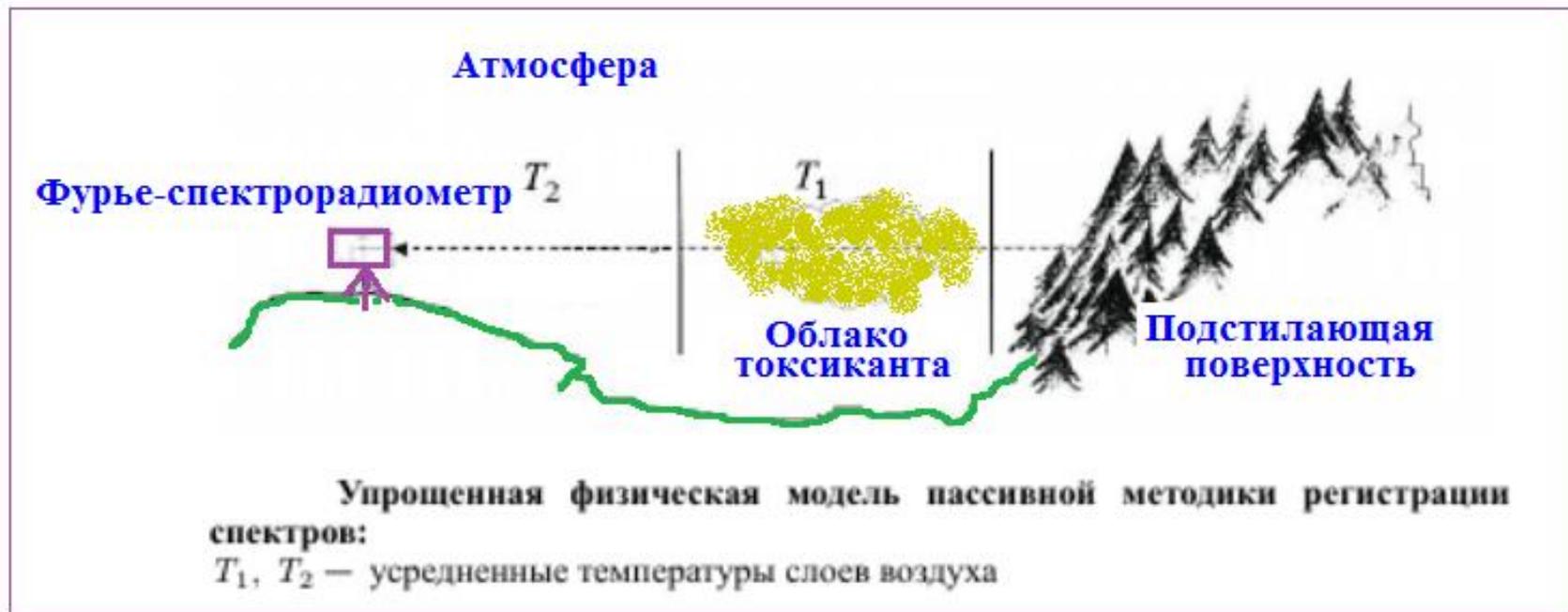
- Схема использования внутреннего отражения (НПВО) для регистрации спектров без предварительной пробоподготовки. В пластине из высокопреломляющего материала происходит полное внутреннее отражение ИК излучения, при котором электромагнитные волны проникают в оптически менее плотную среду.



- Внизу спектр НПВО кожи здорового человека, $A_{1120} < A_{1040}$, средний спектр (синий) и верхний спектр (чёрный) отвечает начальной стадии и более тяжёлой форме диабета, $A_{1120} > A_{1040}$.



Дистанционный мониторинг атмосферы методами Фурье-спектроскопии (безпроботборный контроль).



Упрощённая схема пассивной методики дистанционной регистрации ИК спектров. Спектр сравнения – собственное тепловое излучение подстилающих поверхностей (атмосфера, земля, здания, облака и др.). Полосы собственного теплового излучения газов-загрязнителей не должны перекрываться с полосами излучения компонентов атмосферы.

Дистанционный мониторинг атмосферы методами Фурье-спектроскопии (безпробоотборный контроль).



Дистанционное обнаружение и индикация утечки газообразного диэлектрика и хладогента гексафторида серы из высоковольтного трансформатора. Панорамный Фурье спектрометр Block I-SPEC. Уровень концентрации газа маркируется интенсивностью окраски. Время обработки одного кадра 1 с при разрешении 16 см^{-1} . Спектрометр укомплектован телевизионной камерой.

Портативные спектрометры с преобразованием Фурье используются для производственного контроля и мониторинга окружающей среды.

- За последние 10 лет получило развитие новое поколение аналитических инструментов, отличающихся компактностью, мобильностью, развитым программным обеспечением. Эти приборы обеспечивают высокое качество измерений в режиме on line, что важно в условиях производства.



Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

Влияние линейности шкалы (в см^{-1} или в мкм) на вид ИК спектров плёнки полистирола.

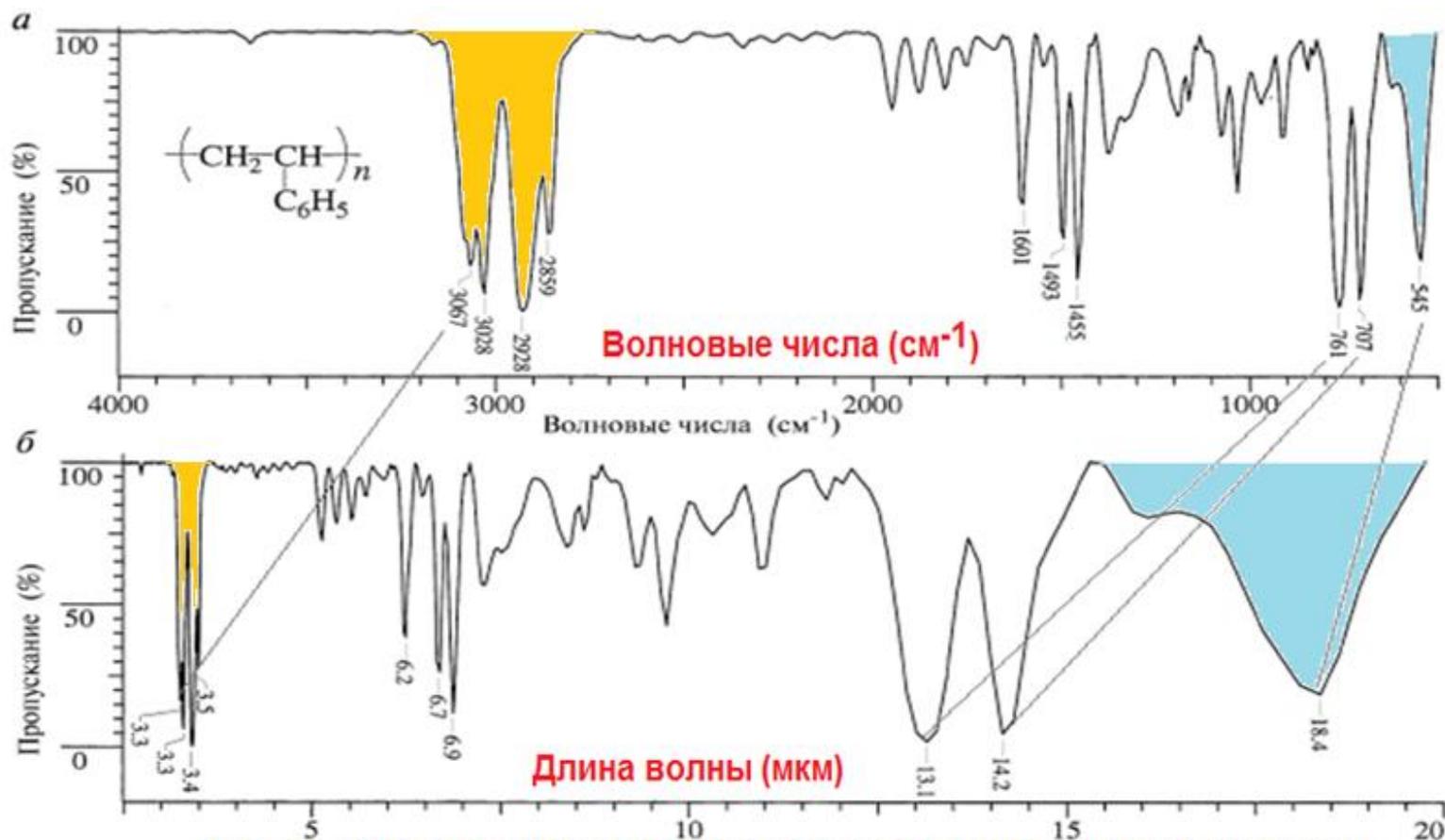
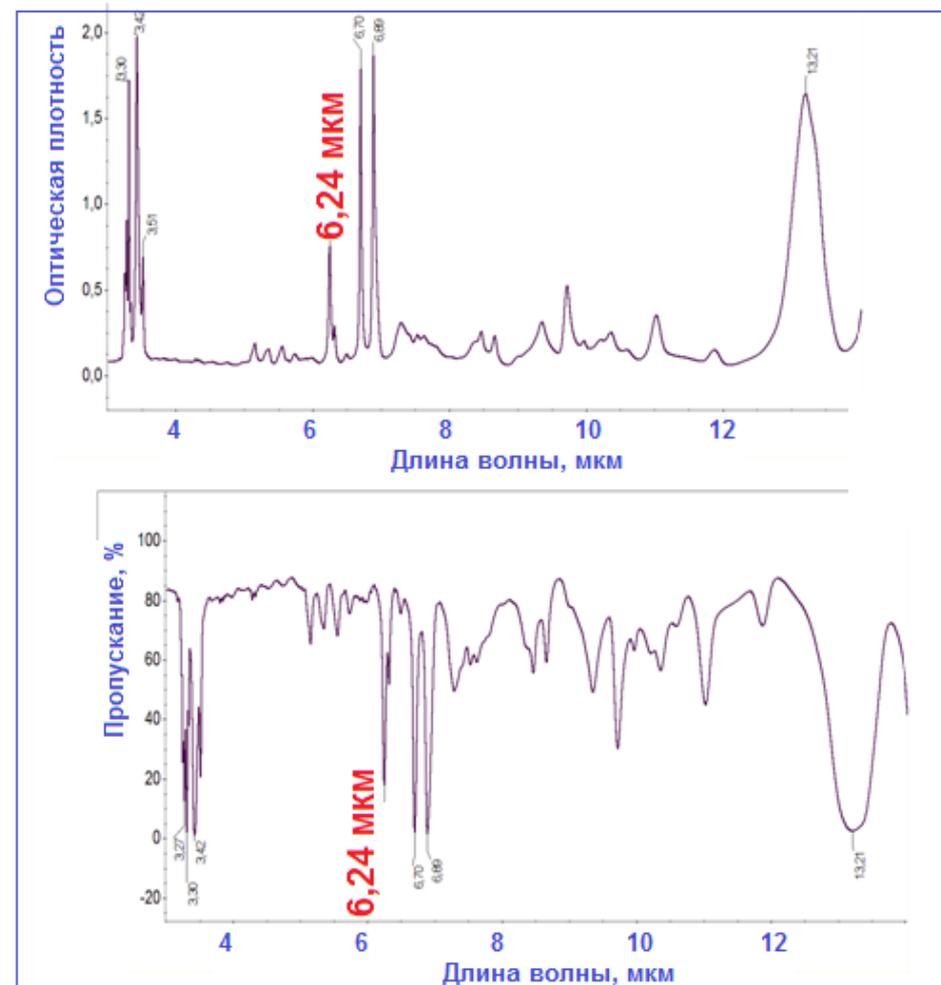
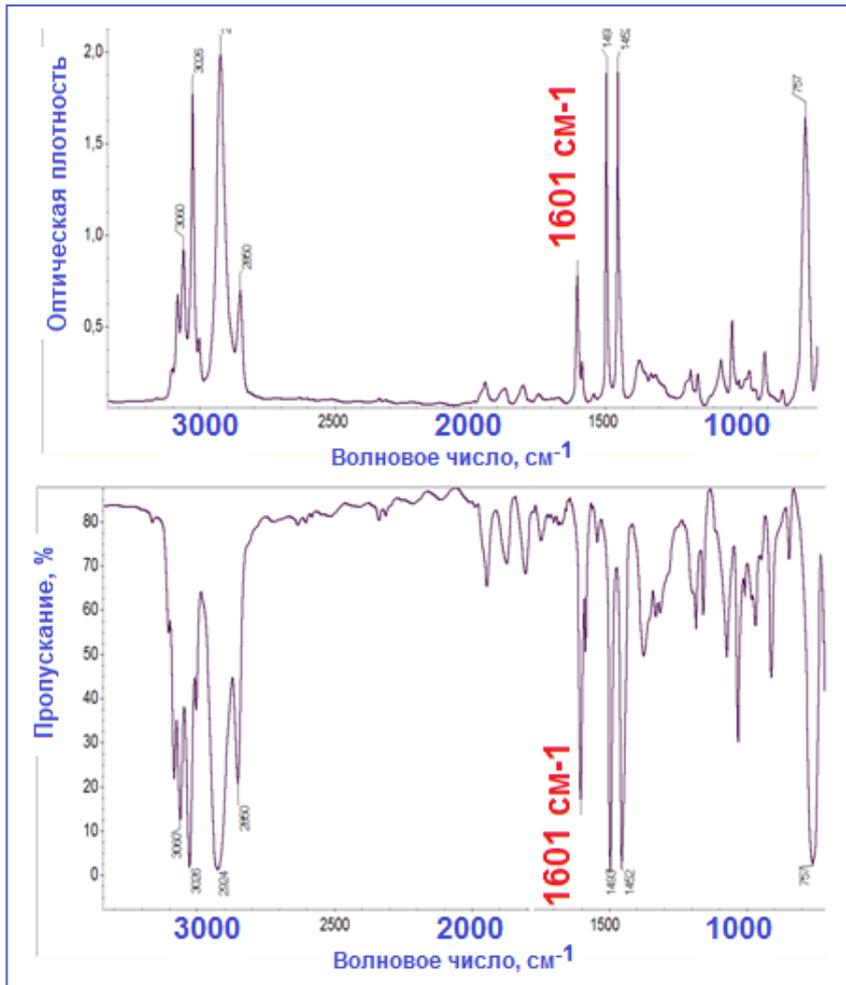


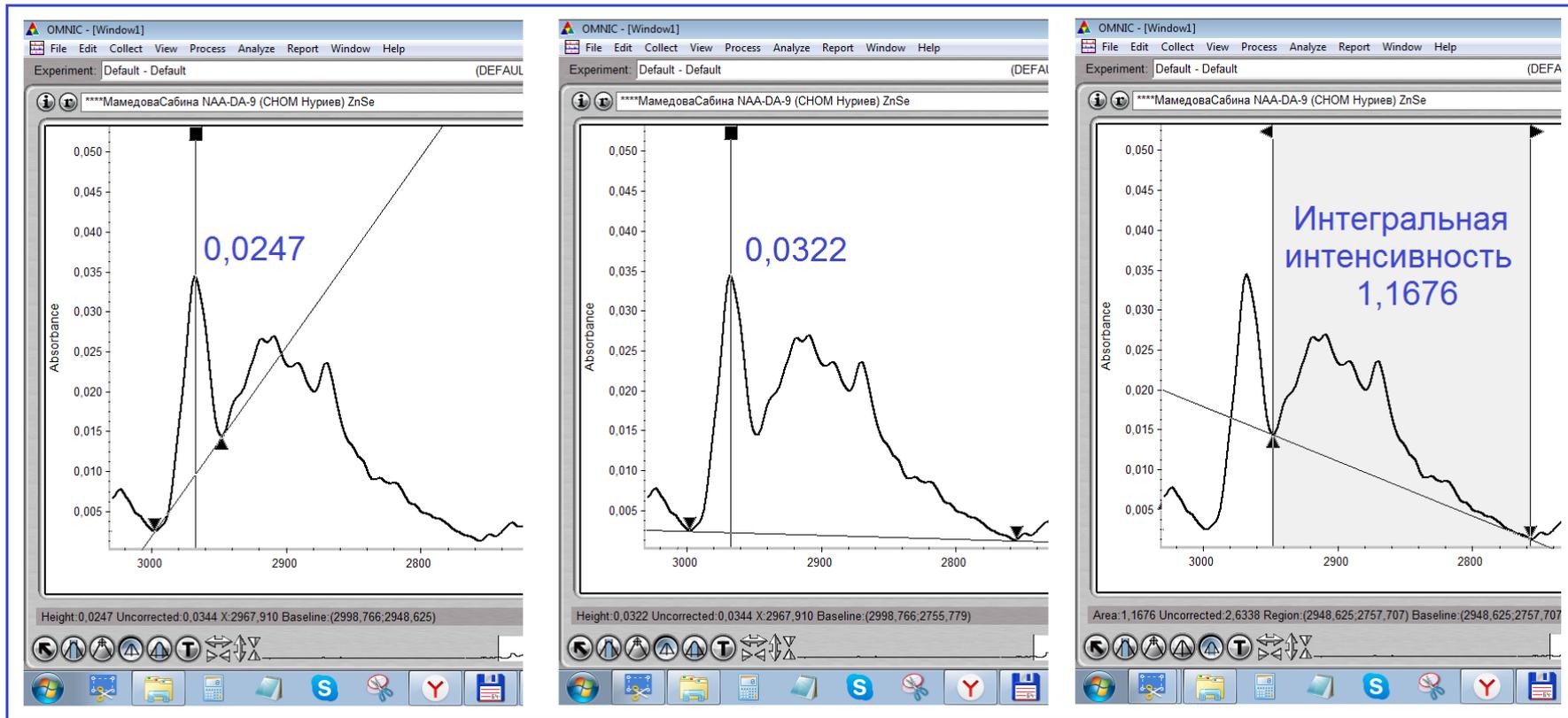
Рис. 2.6. ИК-Спектры одной и той же пробы полистирола. (а) Шкала линейна по отношению к волновым числам, см^{-1} , (б) шкала линейна по отношению к длинам волн, мкм

ИК спектр плёнки полистирола в разных координатах.

Влияние линейности шкалы (в см^{-1} или в $\mu\text{м}$) на вид ИК спектров.



Измерение интенсивностей в ИК спектрах.



Обзор ИК спектров основных классов органических соединений.

http://sdfs.db.aist.go.jp/sdfs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi

АЛКАНЫ

Область валентных колебаний

C-H связей 2750-2950 cm^{-1} ,

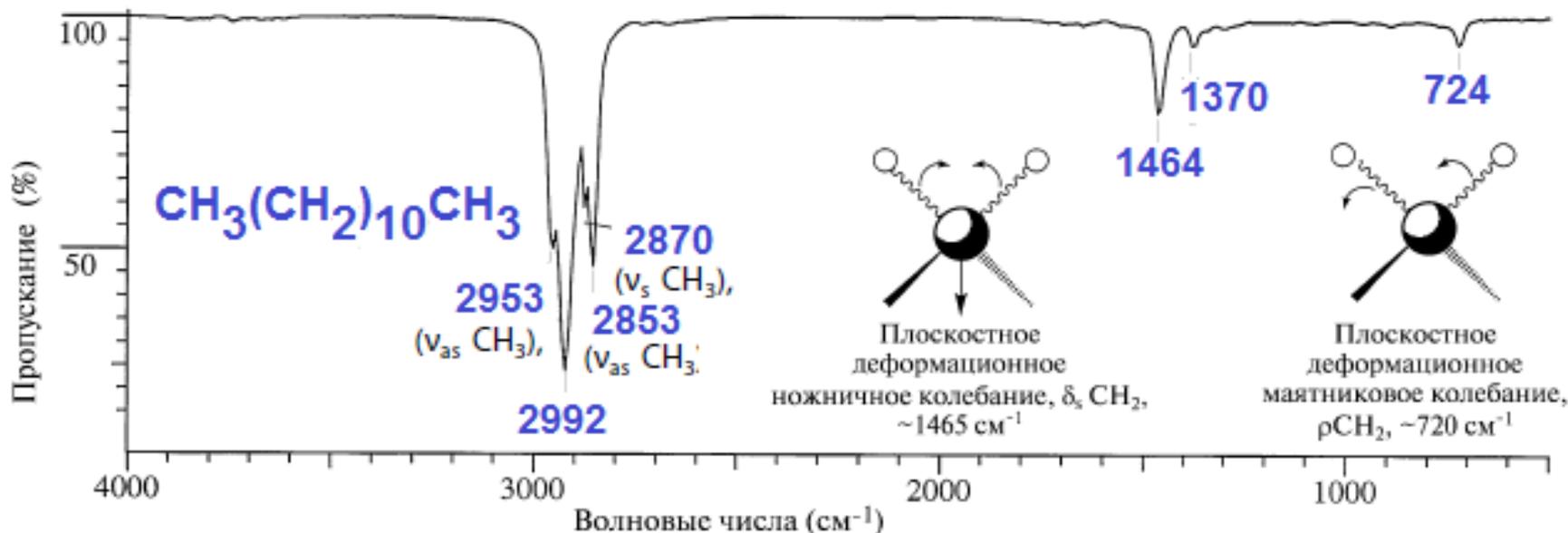
деформационных колебаний

CH_2 1460 – 1380 cm^{-1} ,

скелетные колебания связей C-C не характеристичны.

Алканы. ИК спектр додекана $C_{12}H_{26}$, число атомов $n=38$, число нормальных колебаний $N=3*38-6=108$.

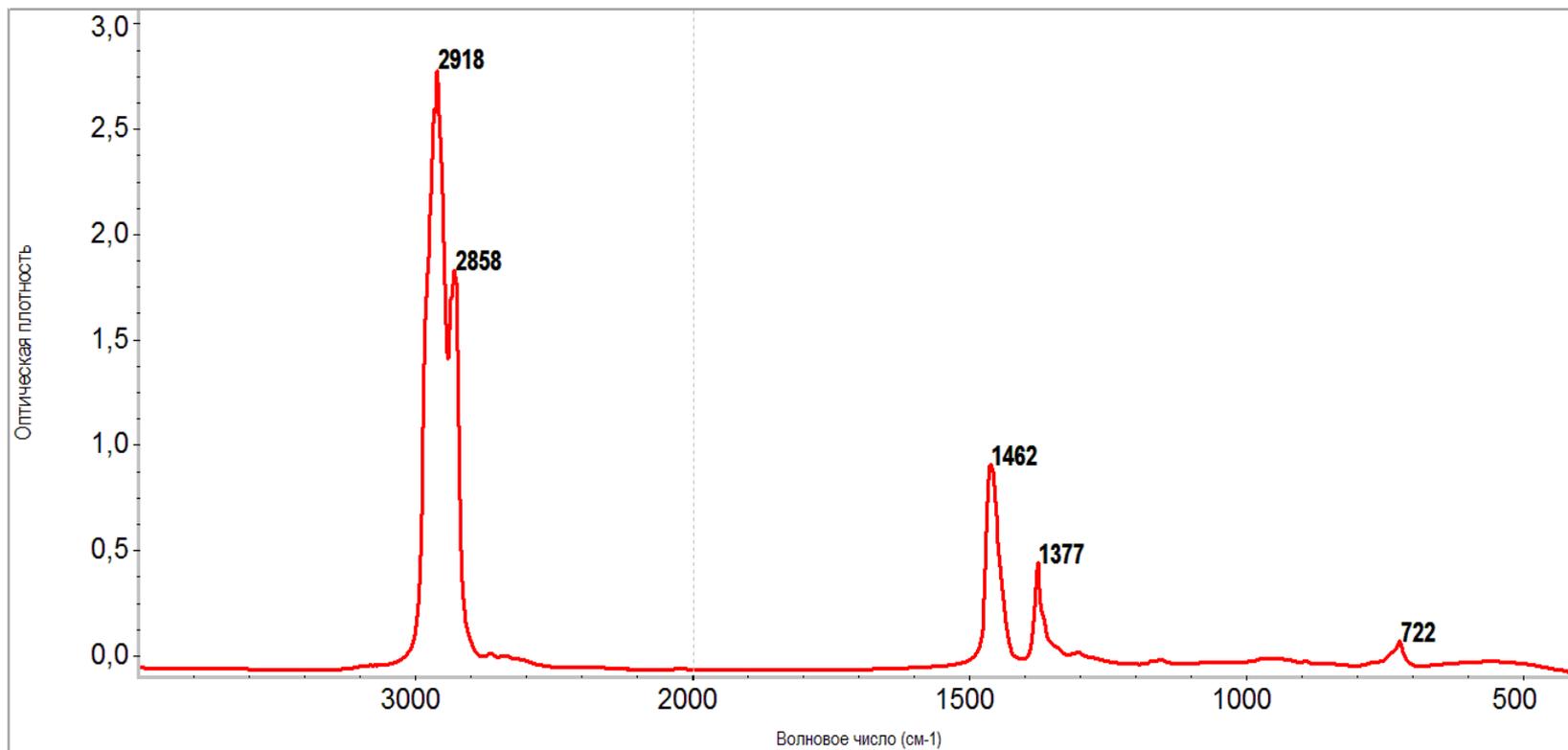
IR tutor



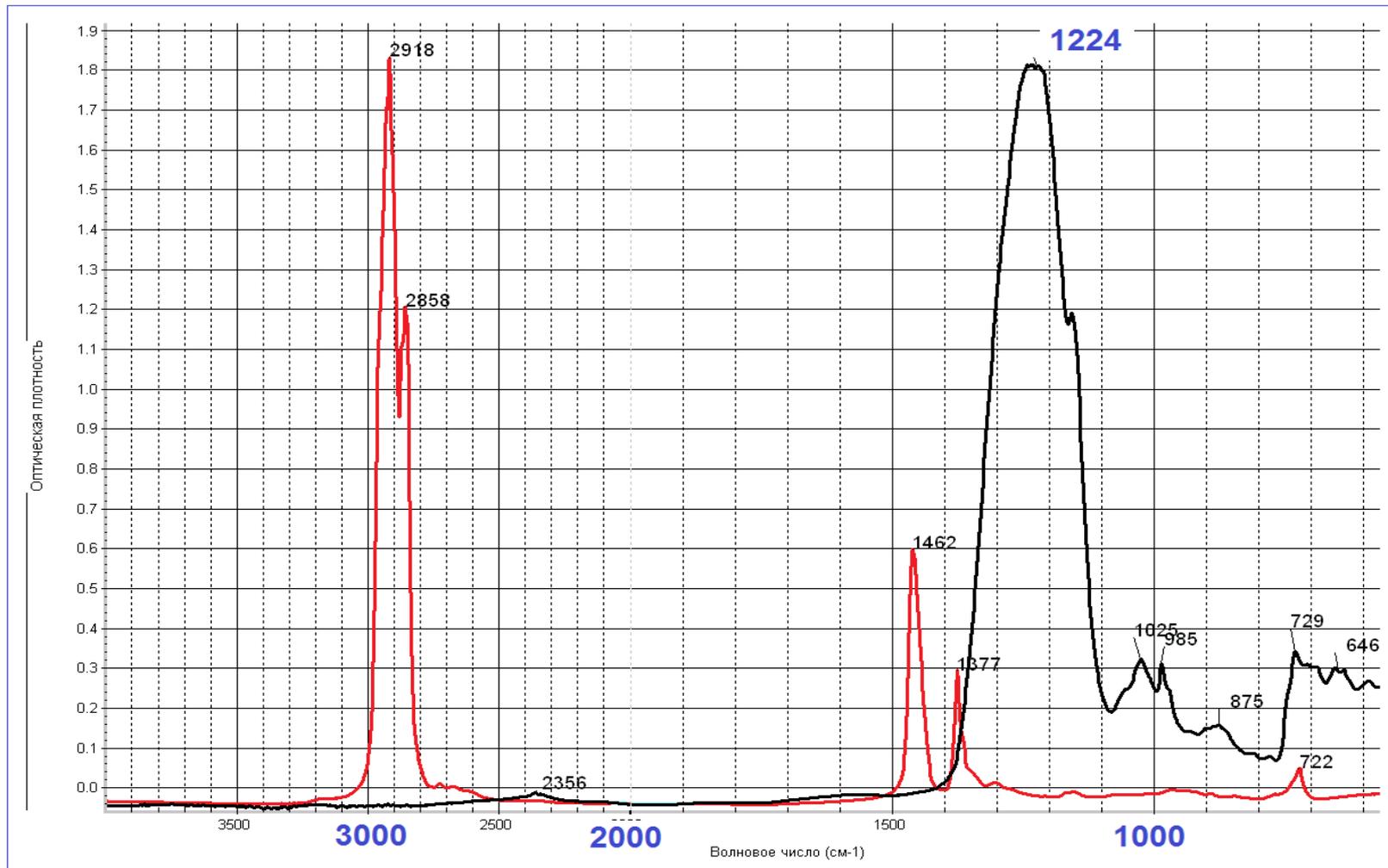
ИК-Спектр додекана

Валентные колебания C-H (cm^{-1}): 2953 ($\nu_{as} CH_3$), 2870 ($\nu_s CH_3$), 2922 ($\nu_{as} CH_2$), 2853 ($\nu_s CH_2$); деформационные колебания C-H (cm^{-1}): 1464 ($\delta_s CH_2$), 1450 ($\delta_{as} CH_3$), 1379 ($\delta_s CH_3$); маятниковое колебание группы CH_2 : 724 cm^{-1} (ρCH_2)

Алканы. Вазелиновое масло- смесь углеводородов (Nujol) используется для приготовления суспензий твёрдых веществ при съёмке их ИК спектров. В некоторых случаях используется фторированное вазелиновое масло или гексахлорбутадиен.



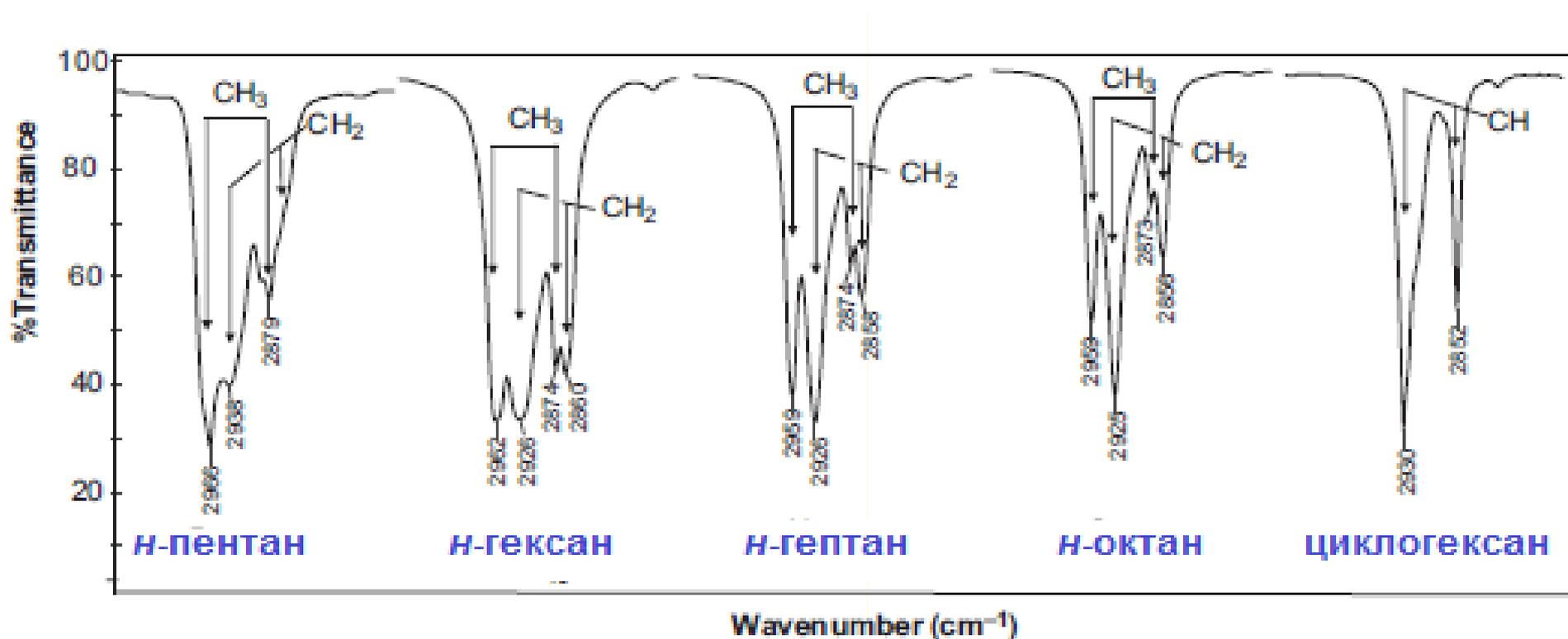
ИК спектр фторированного вазелинового масла для подготовки твёрдых проб. Полосы колебаний C-H отсутствуют, можно использовать гексахлорбутадиеи.



Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

Сложная структура полос валентных колебаний С-Н в углеводородах. Дополнительные полосы могут возникать из-за резонанса Ферми (более подробно ниже) между валентными колебаниями С-Н и обертонами деформационных колебаний метиленовых групп 1480-1440 см⁻¹.

(По данным Ларкина).



Оценочные значения волновых чисел валентных колебаний связей
С-Н, С-D, С-T.

Силловые постоянные всех связей равны $K_{C-X} = 9,331 [10^6 \text{ см}^{-2}]$

Молекулы	Двухатомные фрагменты	Приведённые массы (m_1+m_2)/ m_1*m_2	Расчёт ν_{C-X} см^{-1}	Эксперимент ν_{C-X} см^{-1}
CH_4	С-Н	0,92	2900	2916
CD_4	С-D	1,71	2117	2108
CT_4	С-T	2,4	1769	1738

Гармоническое приближение, μ -приведённая масса

$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{K}{\mu}}$$

Сравнение результатов квантово-химических расчётов геометрии и колебательного спектра метана с экспериментальными данными по длинам связей C-H (в Å) и волновым числам колебаний (см⁻¹, в скобках указаны типы симметрии колебаний).

	Хартри-Фок HF/6-31G(d)	Меллер-Плессет MP2/6-31G(d)	Бекке-Ли-Янг-Парр B3LYP/6-31G(d)	Эксперимент
R(C-H)	1,0837	1,0837	1,0933	1,094
ν CH	3197	3112	3053	2917 (A ₁)
δ HCN	1703	1626	1594	1534 (E)
ν CH	3301	3250	3163	3019 (T ₂)
δ HCN	1488	1414	1374	1306 (T ₂)

Применение ИК спектроскопии для исследования молекулярной ориентации и степени кристалличности полимеров, которые содержат кристаллические и аморфные области. Для таких измерений используется **поляризованное ИК излучение**.

в ИК-спектре полипропилена (ПП) имеются хорошо различимые полосы поглощения, отвечающие кристаллической и аморфной фазам (рис. 2.7). Для характеристики функции ориентации кристаллической фазы обычно используются полосы поглощения валентно-деформационных колебаний при **998** или **841** см^{-1} . Исследование функции ориентации аморфной компоненты может быть основано также на анализе полосы поглощения валентно-деформационного колебания при 973 см^{-1} , характерной одновременно для аморфной и кристаллической фаз.

Как видно из представленного спектра, изменение направления поляризации сопровождается значительными изменениями в спектре. Деформация сопровождается ориентацией макромолекул в направлении оси вытяжки и, соответственно, увеличением интенсивности полос поглощения для поляризации совпадающей с осью растяжения.

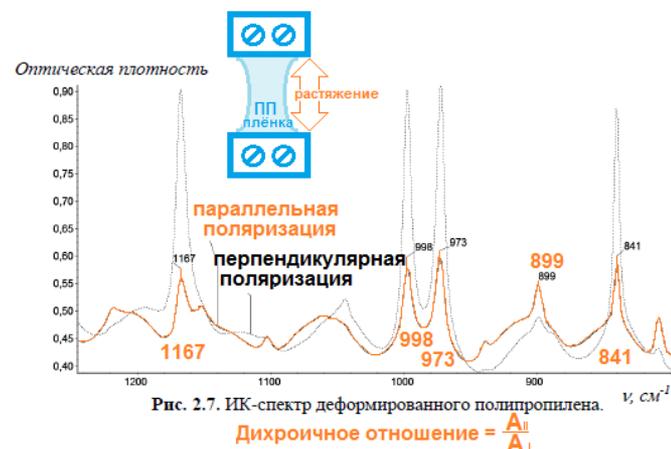


Рис. 2.7. ИК-спектр деформированного полипропилена.

Определение степени кристалличности ПЭ. (Градуировка по рентгеноструктурным данным).

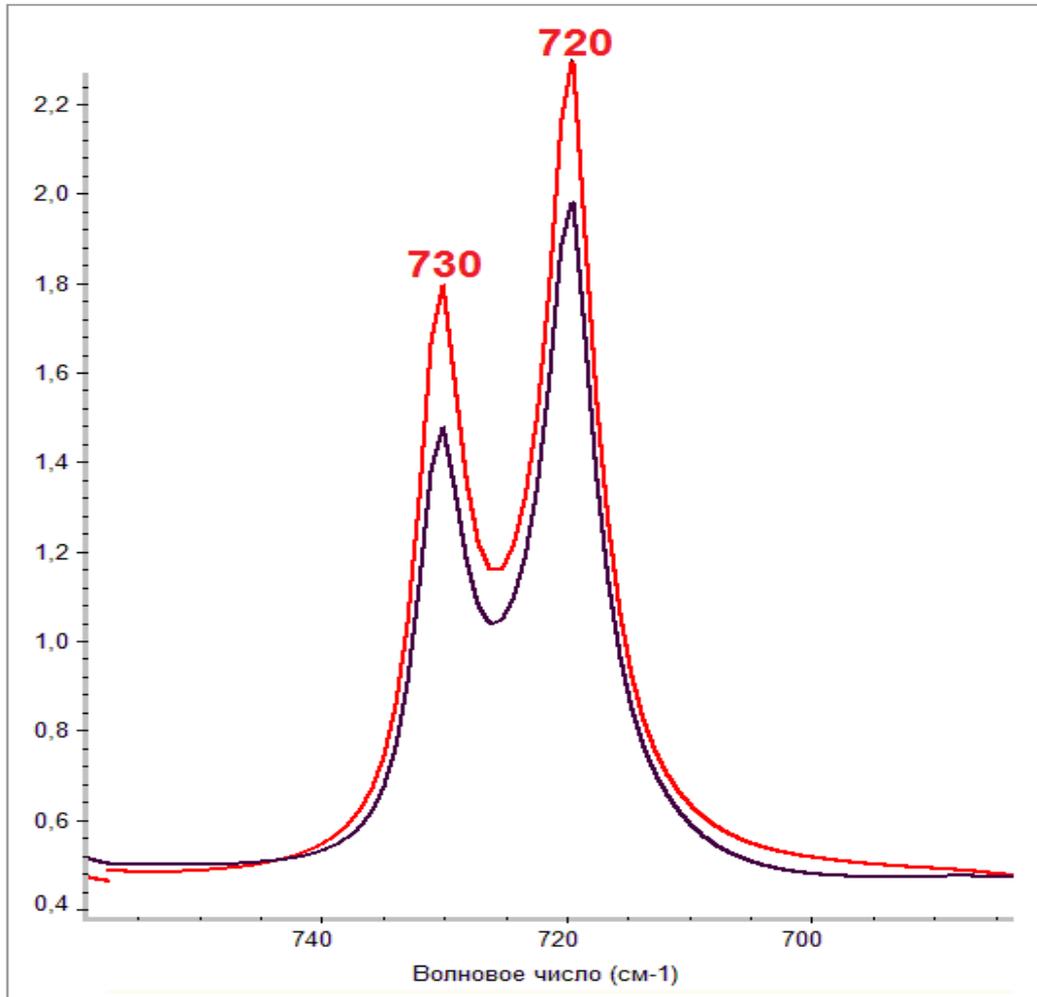
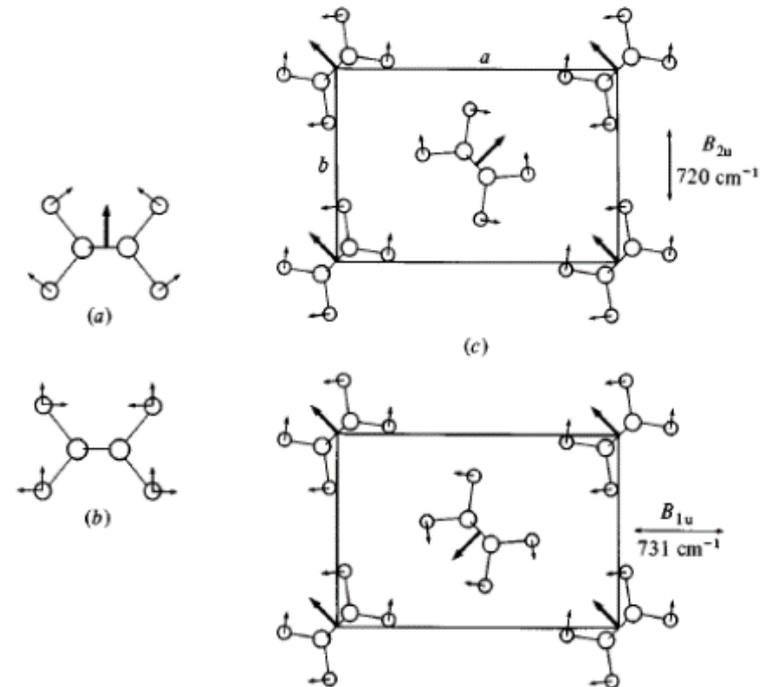
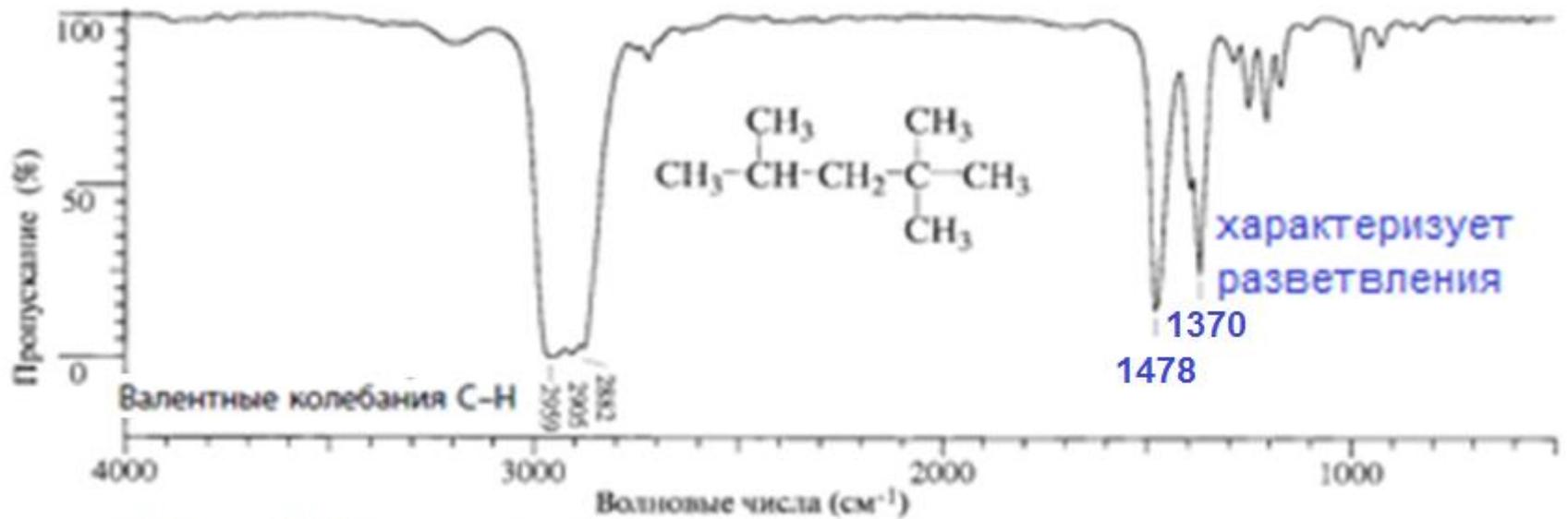


Fig. 6.14. The nature of the B_{1u}/B_{2u} rocking doublet modes in polyethylene: (a) the rocking vibration of a single chain viewed along the chain axis. For simplicity the motions of the carbon atoms are not shown. The broad arrow indicates the direction of the instantaneous dipole moment, which is the vector sum of those due to the four C—H bonds; (b) the bond dipole changes resolved parallel and perpendicular to the projected C—C bond direction; (c) the two allowed phase relationships of the vibrations of the two chains in the unit cell for factor group modes and the corresponding net dipole changes.



Алканы. ИК спектр изооктана.



ИК-Спектр 2,2,4-триметилпентана (изооктана).

Видны перекрывающиеся дублеты для *tert*-бутильной и изопропильной групп в области 1400–1340 см⁻¹.

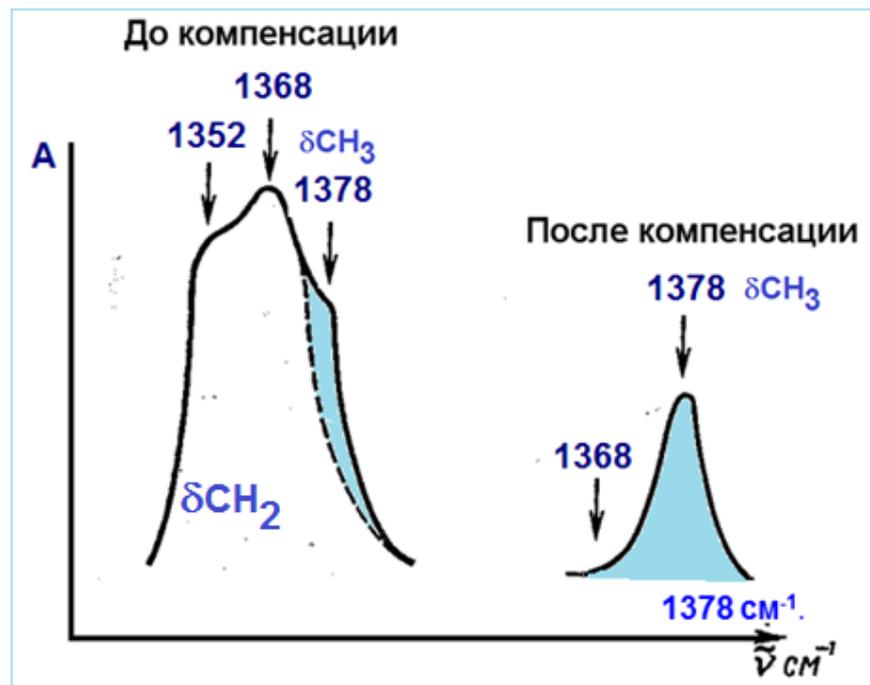
Обратите внимание на отсутствие полос(ы) маятниковых колебаний метиленовых групп в области 1000–800 см⁻¹

Проблема разветвлённости полиэтилена.

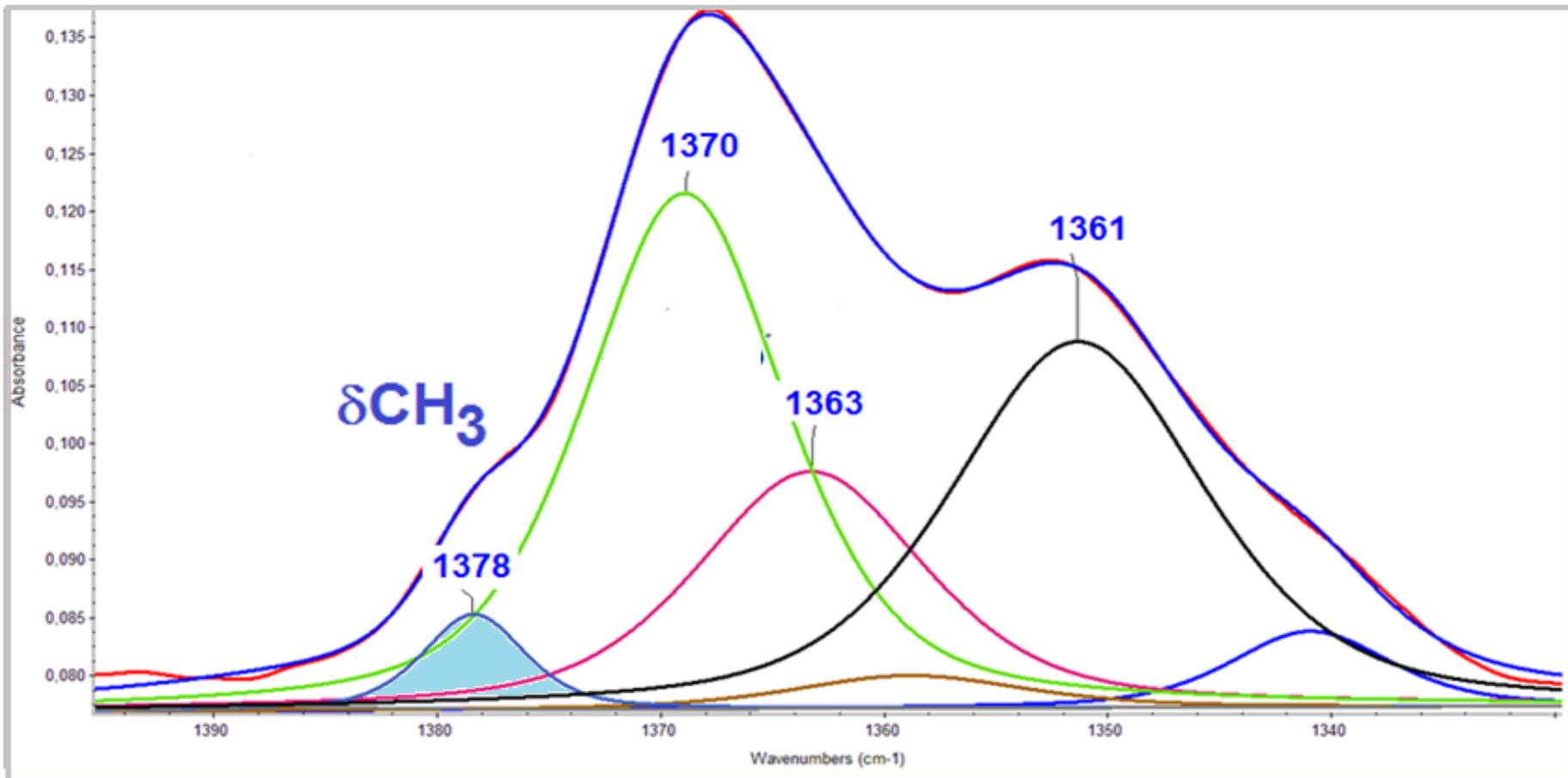
В ПЭВД (низкой плотности) имеется 15-25 ответвлений на 1000 атомов С (88 р/кг),
в ПЭНД 3-6 на 1000 атомов С, что сказывается на его свойствах (до 106 р/кг).

Количественно степень разветвленности ПЭ определяют как число концевых метильных групп, приходящееся на 100 или 1000 атомов углерода полимерной цепи ($\text{СН}_3/100 \text{ С}$). Для такого определения используют колебание $\delta(\text{СН}_3)$ с частотой 1378 см^{-1} . Так как эта полоса перекрывается более интенсивным поглощением $1368\text{-}1352 \text{ см}^{-1}$, то его компенсируют с помощью клиновидной плёнки из очень высокомолекулярного полиэтилена низкого давления или из полиметилена. При этом удается полностью скомпенсировать дублет при 1368 и 1352 см^{-1} и получить неискаженную симметричную полосу колебаний СН_3 группы в разветвлениях. Интенсивность этой полосы прямо пропорциональна концентрации СН_3 групп. После построения соответствующей градуировки метод позволяет определять содержание СН_3 групп.

Полиэтилен	Мол. масса	Плотность, г/м ³	Температура плавления, 0С	Модуль упругости, МПа
Низкой плотности (высокого давления)	50-800 тыс.	0,913-0,914	102-105	100-200
Высокой плотности (низкого давления)	50 тыс. - $3 \cdot 10^6$	0,919-0,973	125-137	400-1250



Разложение перекрывающихся полос на составляющие для выявления концевых метильных групп в полиэтилене высокого давления по интенсивности полосы деформационных колебаний δCH_3 группы.



Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

Товарная номенклатура внешнеэкономической деятельности - классификатор товаров, используемый при проведении таможенных операций

Изменения в ЕТТ с 1 сентября 2019 года

Таблица соответствия кодов ТН ВЭД ТС 2012 года и ТН ВЭД ЕАЭС 2017 года

Таблица соответствия кодов ТН ВЭД ЕАЭС и ОКПД 2

Основные правила интерпретации ТН ВЭД, сокращения, символы и единицы измерения

Поиск по наименованию или коду ТН ВЭД

Поиск

01-05	I. Живые животные; продукты животного происхождения (Группы 01-05)
06-14	II. Продукты растительного происхождения (Группы 06-14)
15	III. Жиры и масла животного или растительного происхождения и продукты их расщепления; готовые
28-38	VI. Продукция химической и связанных с ней отраслей промышленности (Группы 28-38)
39-40	VII. Пластмассы и изделия из них; каучук, резина и изделия из них (Группы 39-40)
39	Пластмассы и изделия из них
...	I. ПЕРВИЧНЫЕ ФОРМЫ
3901 ...	Полимеры этилена в первичных формах
3901 1 ...	полиэтилен с удельным весом менее 0,94
<u>3901 10 100 0</u>	<u>полиэтилен линейный</u>
3901 10 900 0	прочий
3901 2 ...	полиэтилен с удельным весом 0,94 или более
3901 20 100 0	полиэтилен в одной из форм, упомянутых в примечании 6 (б) к данной группе, с удельным весом 0,958 или более при температуре 23 °С, содержащий: - 50 мг/кг или менее алюминия, - 2 мг/кг или менее кальция, - 2 мг/кг или менее хрома, - 2 мг/кг или менее железа, - 2 мг/кг или менее никеля, - 2 мг/кг или менее титана, и - 8 мг/кг или менее ванадия, для производства сульфохлорированного полиэтилена
3901 20 9 ...	прочий
3901 20 900 1	полиэтилен для нанесения заводского трехслойного антикоррозионного покрытия на трубы большого диаметра 5)
3901 20 900 9	прочий

Введение в специализацию.
Тарасевич Б.Н. ИК

АЛКЕНЫ

Область валентных колебаний

C-H связей 3020-3080 cm^{-1} ,

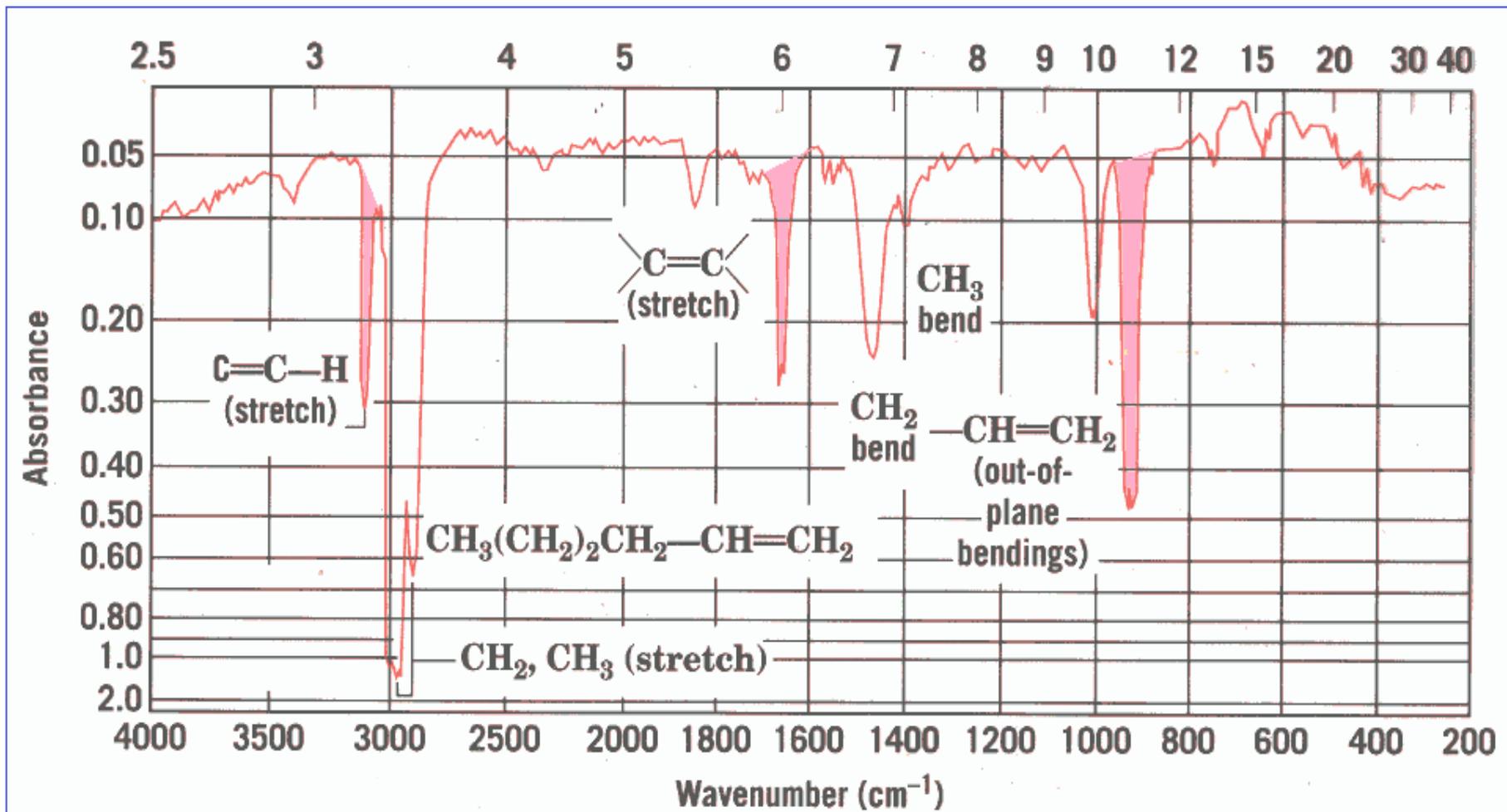
деформационных колебаний

CH_2 675 – 1000 cm^{-1} ,

валентные колебания C=C

1640-1680 cm^{-1}

Алкены. ИК спектр гексена-1.



Алкены. ИК спектр додецена-1.

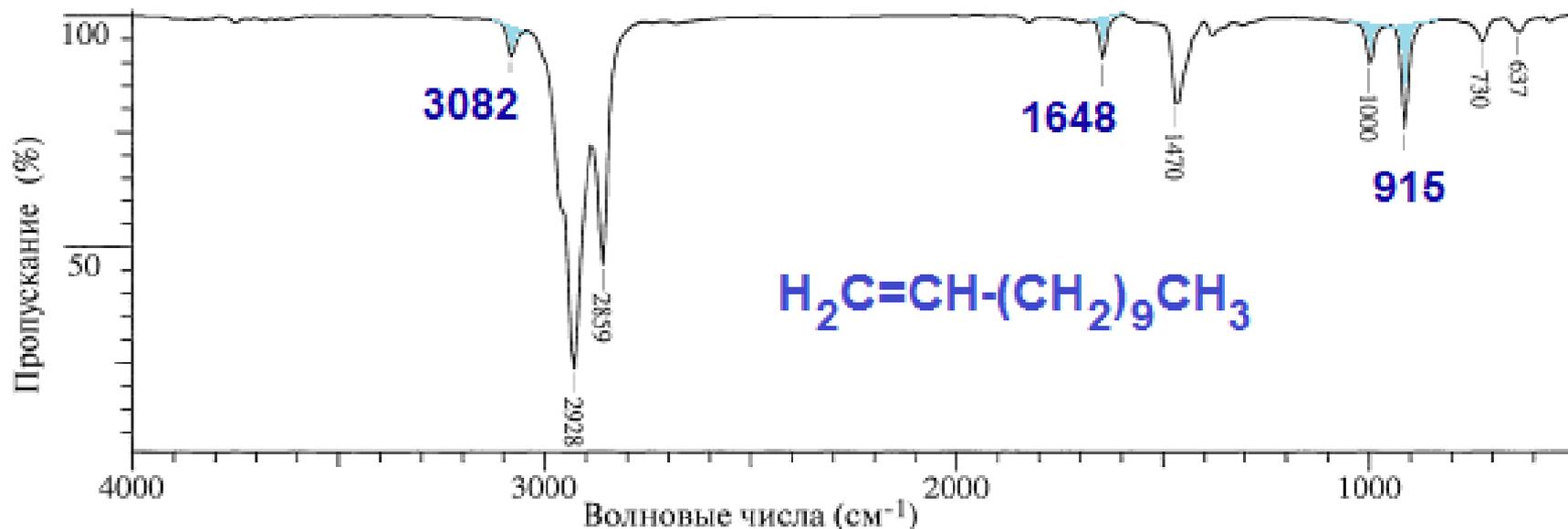


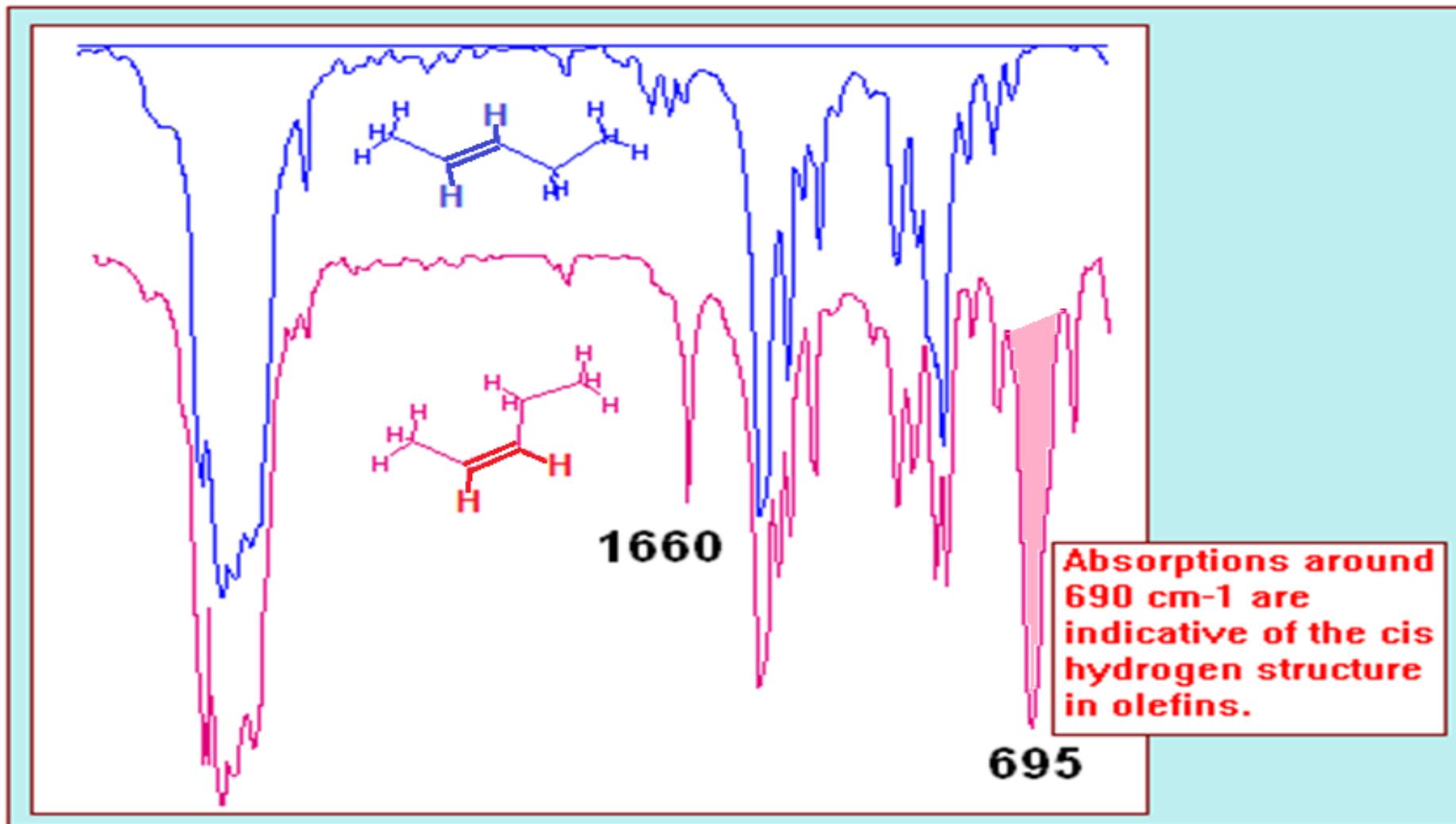
Рис. 2.10. ИК-Спектр додецена-1.

Валентные колебания C–H Обратите внимание на полосу 3082 cm^{-1} валентного колебания C–H в алкеновом звене. Валентное колебание C=C проявляется при частоте 1648 cm^{-1} ,

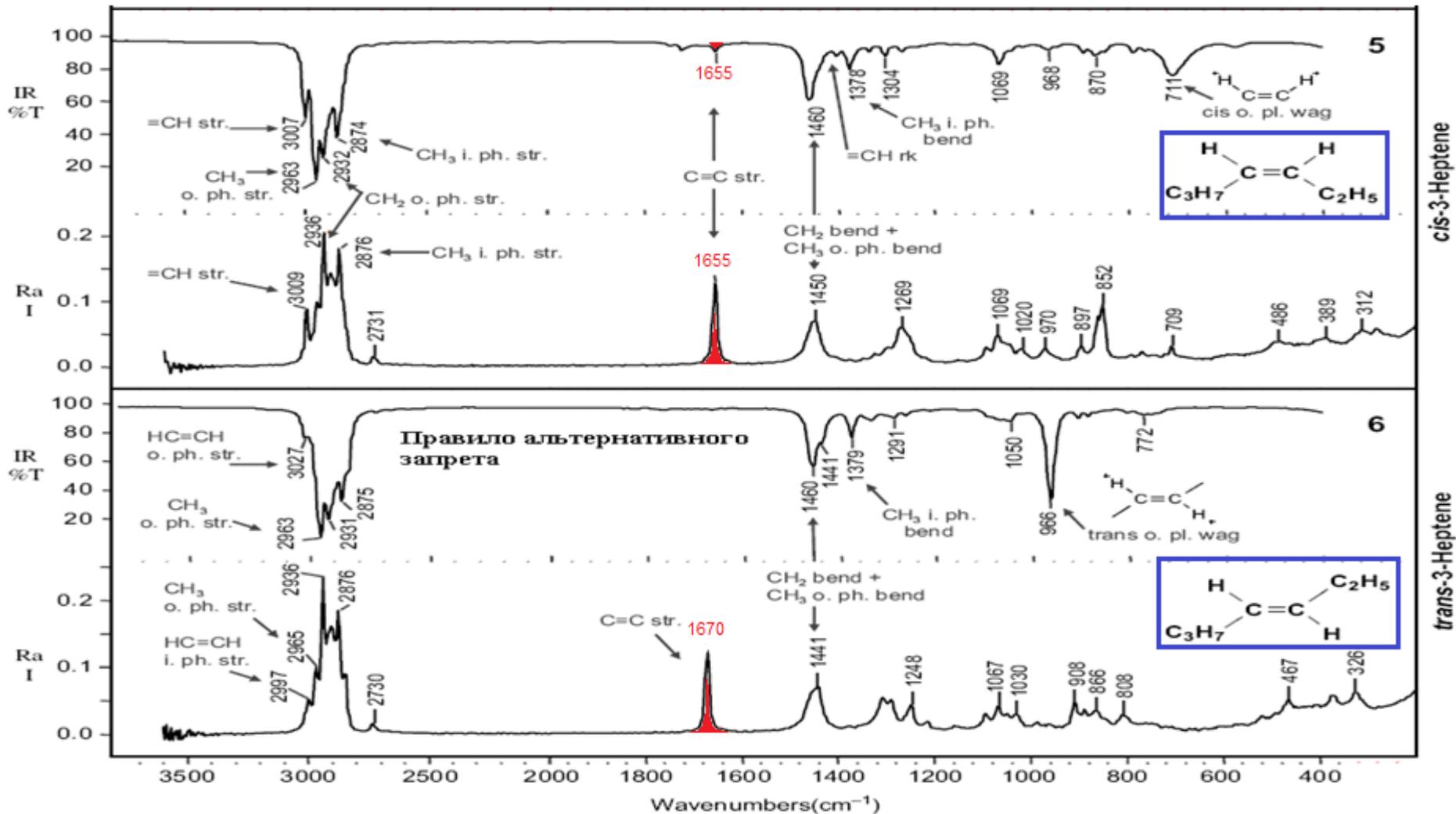
Внеплоскостное деформационное колебание C–H 1000 cm^{-1} , (в алкеновом звене) 915 cm^{-1} . Маятниковое колебание метиленовой группы 730 cm^{-1}

Сравнение ИК спектров *цис*- и *транс*- пентенов-2.

В случае симметричной *транс*- структуры интенсивность полосы валентных колебаний C=C ниже.

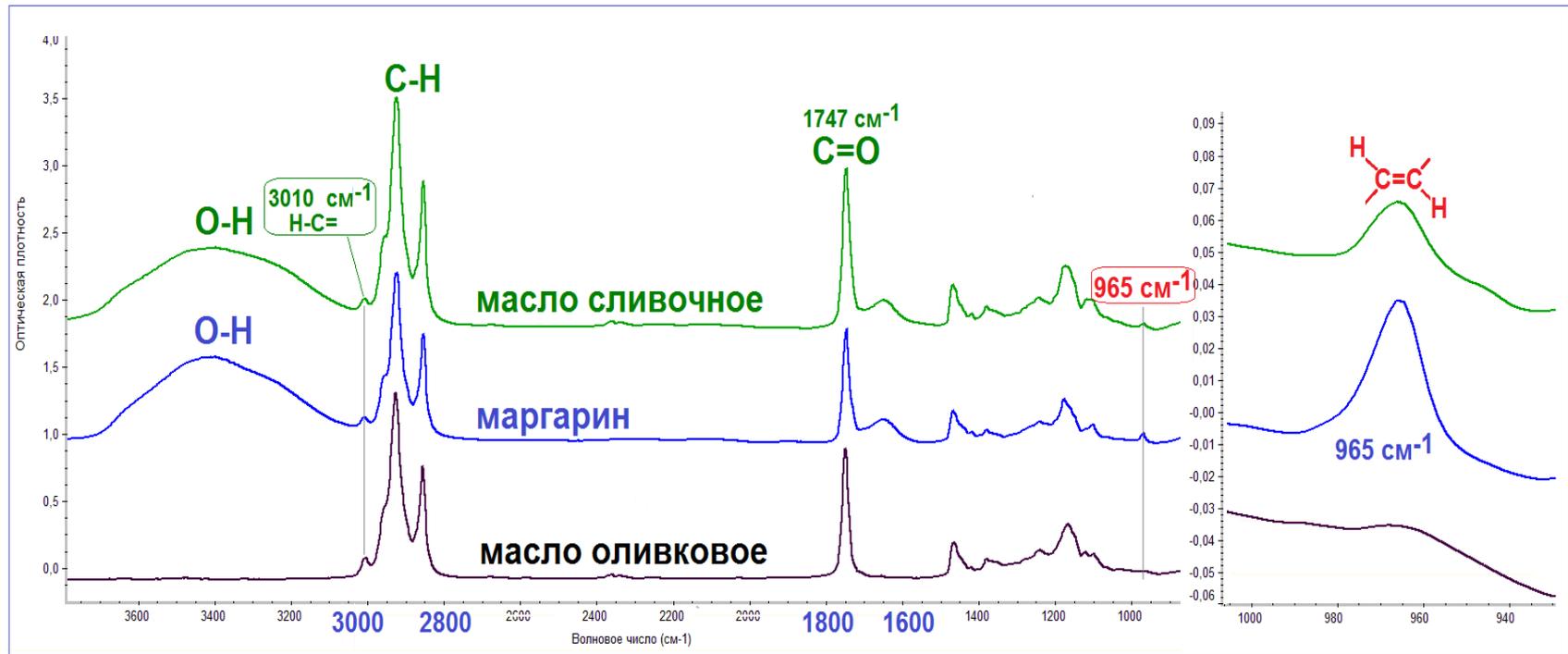


ИК спектры и спектры КР *цис*- и *транс*-гептена.



ИК спектры пищевых масел применяют для исследования проблемы *транс*-изомеров.

(Замечание о методических вопросах).



- Современные исследования показали, что *транс*-изомеры нарушают работу ферментов, отрицательно влияют на клеточные мембраны, увеличивают уровень холестерина в крови и приводят к другим негативным последствиям.

Введение в специализацию.

Тарасевич Б.Н. ИК