



# ФІЗИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНИХ СПОЛУК

вступна лекція



# ЩО ДОСЛІДЖУВАТИ?

- СКЛАД ХІМІЧНИХ СПОЛУК І ЇХ СУМІШЕЙ
- БУДОВУ МОЛЕКУЛ, МІЖМОЛЕКУЛЯРНИХ КОМПЛЕКСІВ, КРИСТАЛІВ І Т. П.
- ПРИРОДУ І ДИНАМІКУ ВНУТРІШНЬОМОЛЕКУЛЯРНИХ ТА МІЖМОЛЕКУЛЯРНИХ ПРОЦЕСІВ
  - КОНФОРМАЦІЙНІ ПЕРЕТВОРЕННЯ
  - ПЕРЕБІГ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ, ЇХ МЕХАНІЗМИ
  - МІЖМОЛЕКУЛЯРНІ ВЗАЄМОДІЇ
- .....



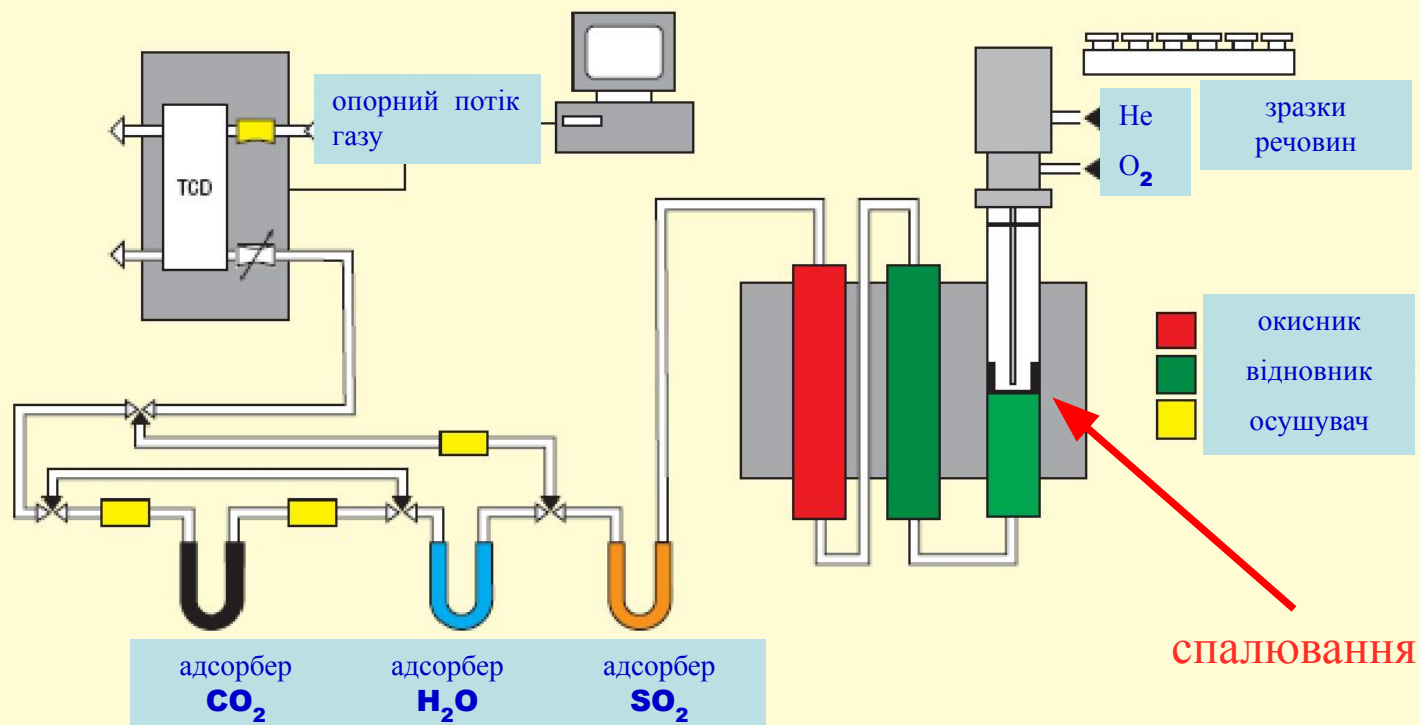
# фізичні і хімічні методи дослідження

- ФІЗИЧНІ МЕТОДИ – ЦЕ ТАКІ, ПРИЦИП ЯКИХ БАЗУЄТЬСЯ НА ФІЗИЧНИХ ЯВИЩАХ, А ХІМІЧНІ – НА ВИКОРИСТАННІ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ



## ПРИКЛАД – КІЛЬКІСНИЙ ЕЛЕМЕНТНИЙ АНАЛІЗ (ДОСЛІДЖЕННЯ СКЛАДУ)

**БАЗУЄТЬСЯ НА РЕАКЦІЇ СПАЛЮВАННЯ (ОКИСНЕННЯ КИСНЕМ)  
СПЛУК, ЩО ДОСЛІДЖУЮТЬСЯ**

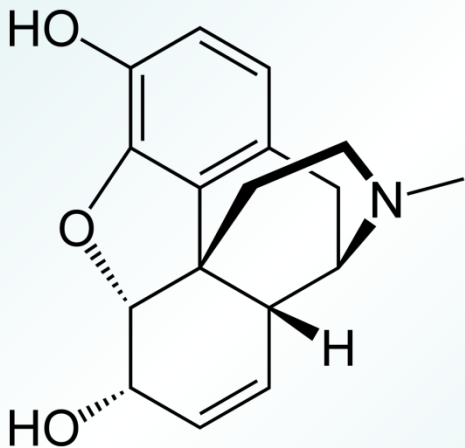




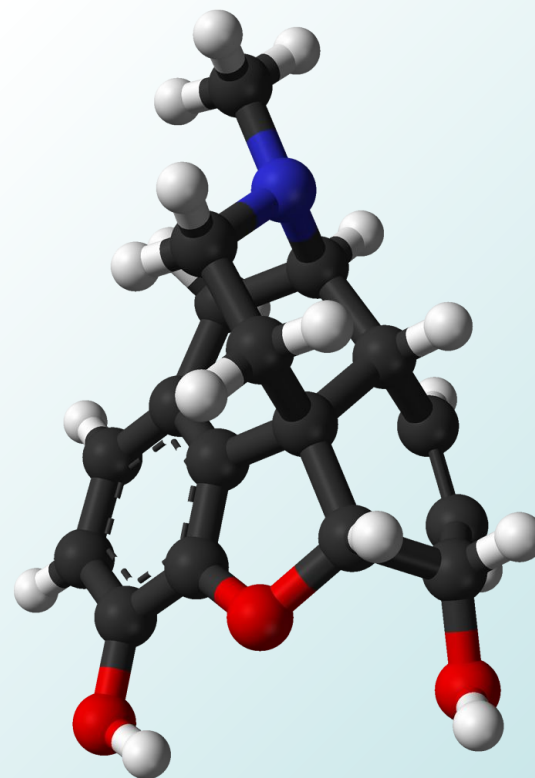
## ІНШИЙ ПРИКЛАД – ВСТАНОВЛЕННЯ БУДОВИ МОРФІНУ ХІМІЧНИМИ МЕТОДАМИ

Виділено з екстракту маку на  
початку 19 століття

Будову встановлено майже  
через 100 років, в 1925 р., на  
основі численних реакцій  
морфіну з кислотами, лугами,  
алкілюючими реагентами,  
хлорування, гідрування і ін.



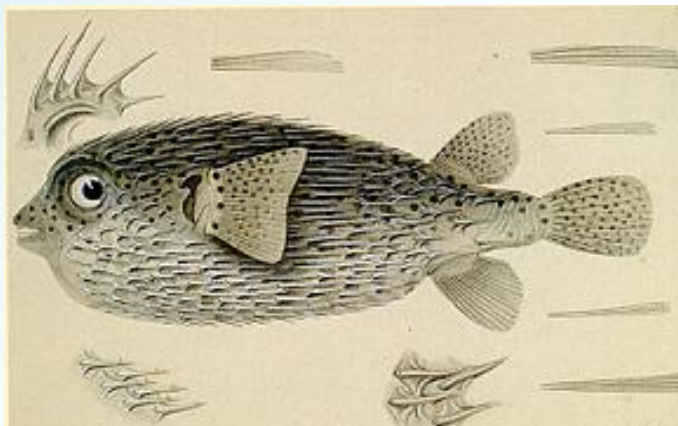
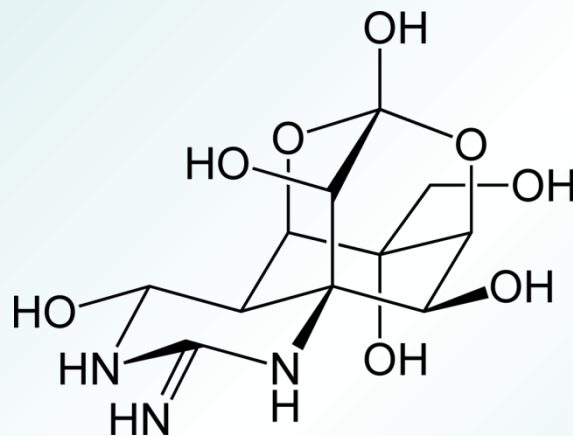
Просторову будову було  
встановлено значно пізніше...





## БУДОВА ТЕТРОДОТОКСИНУ

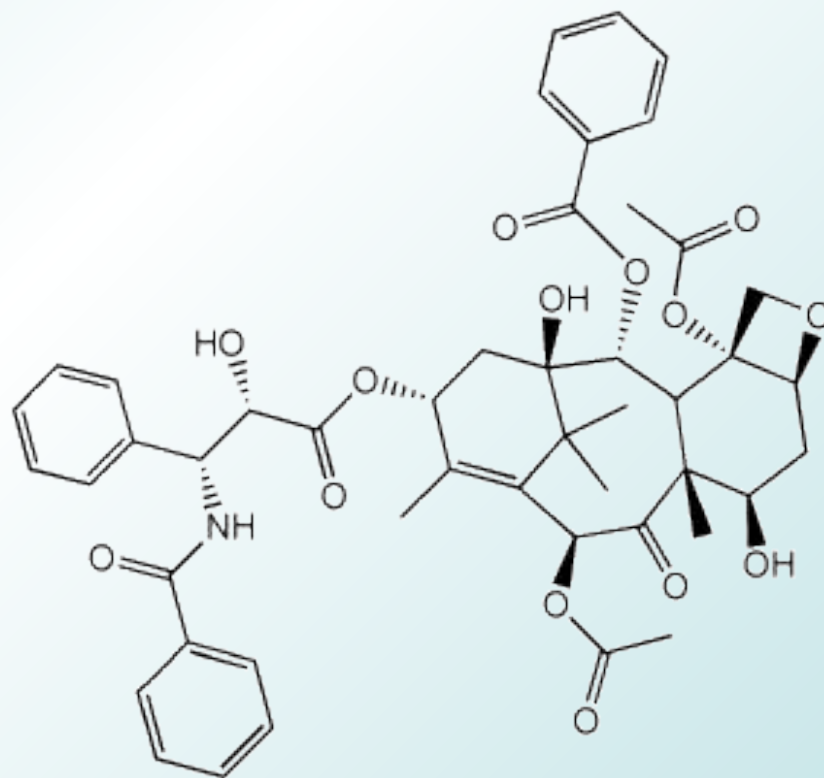
Була встановлена з використанням хімічних та фізичних методів дослідження за декілька років (1960-ті)





## БУДОВА ТАКСОЛУ

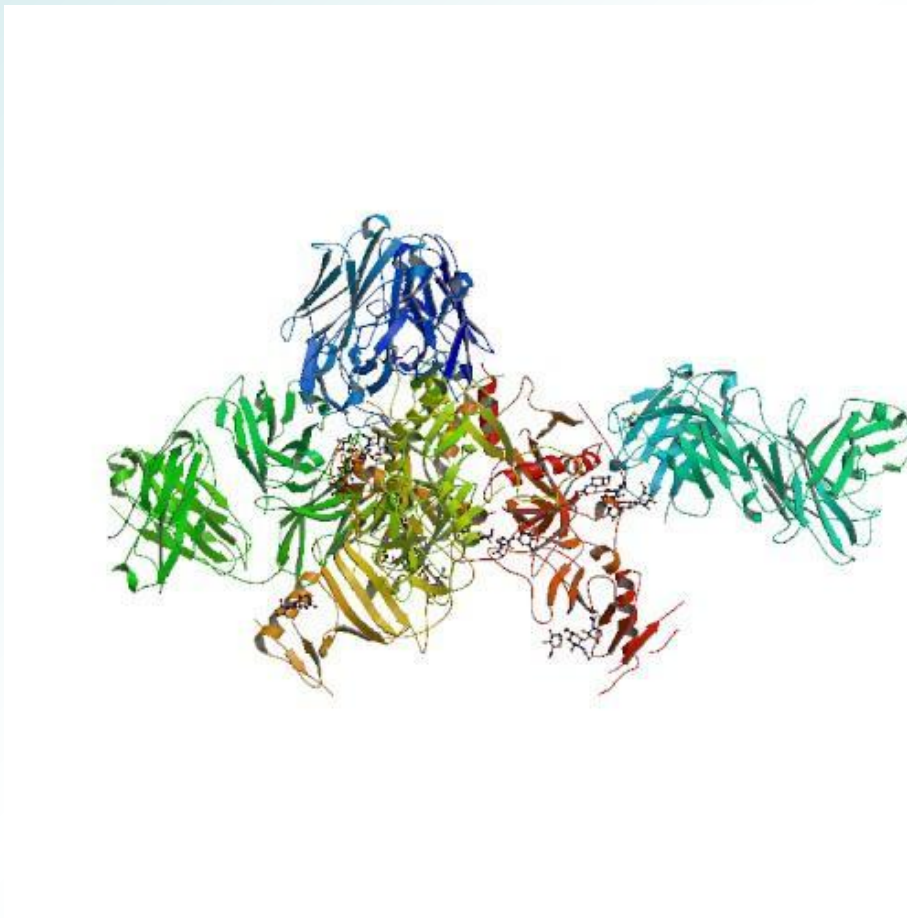
встановлена методами мас-спектрометрії, ЯМР та ІЧ-спектроскопії на початку 1970-х років





## БУДОВА ПРОТЕЇНІВ

(глікопротеїн вірусу Ебола в комплексі з нейтралізуючим антитілом)



(2008) Nature **454**: 177-182











# фізичні методи дослідження

## СПЕКТРОСКОПІЧНІ

**-БАЗУЮТЬСЯ НА ВЗАЄМОДІЇ  
ЕЛЕКТРОМАГНІТНОГО  
ВИПРОМІНЮВАННЯ З  
РЕЧОВИНАМИ**

- поглинання
- випромінювання
- розсіювання
- дифракція
- обертання площини  
поляризації

## НЕСПЕКТРОСКОПІЧНІ

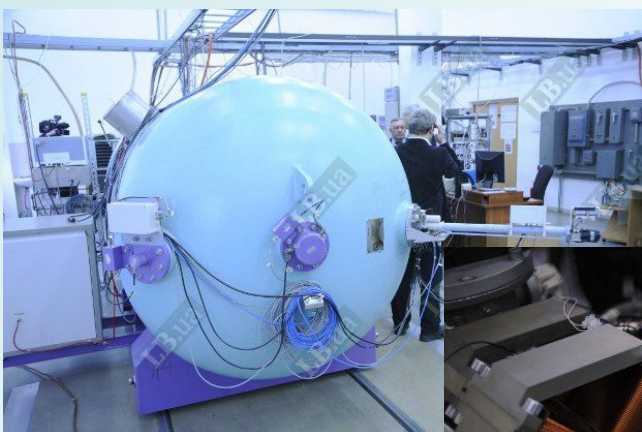
**-БАЗУЮТЬСЯ НА ІНШИХ  
ФІЗИЧНИХ ЯВИЩАХ**

- взаємодія з магнітним  
полем
- кондуктометричні  
методи
- мас-спектрометрія

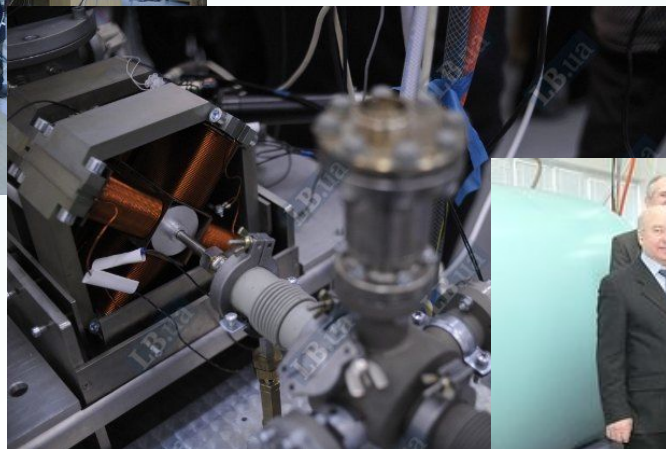
і багато ін.



# неспектроскопичні методи дослідження

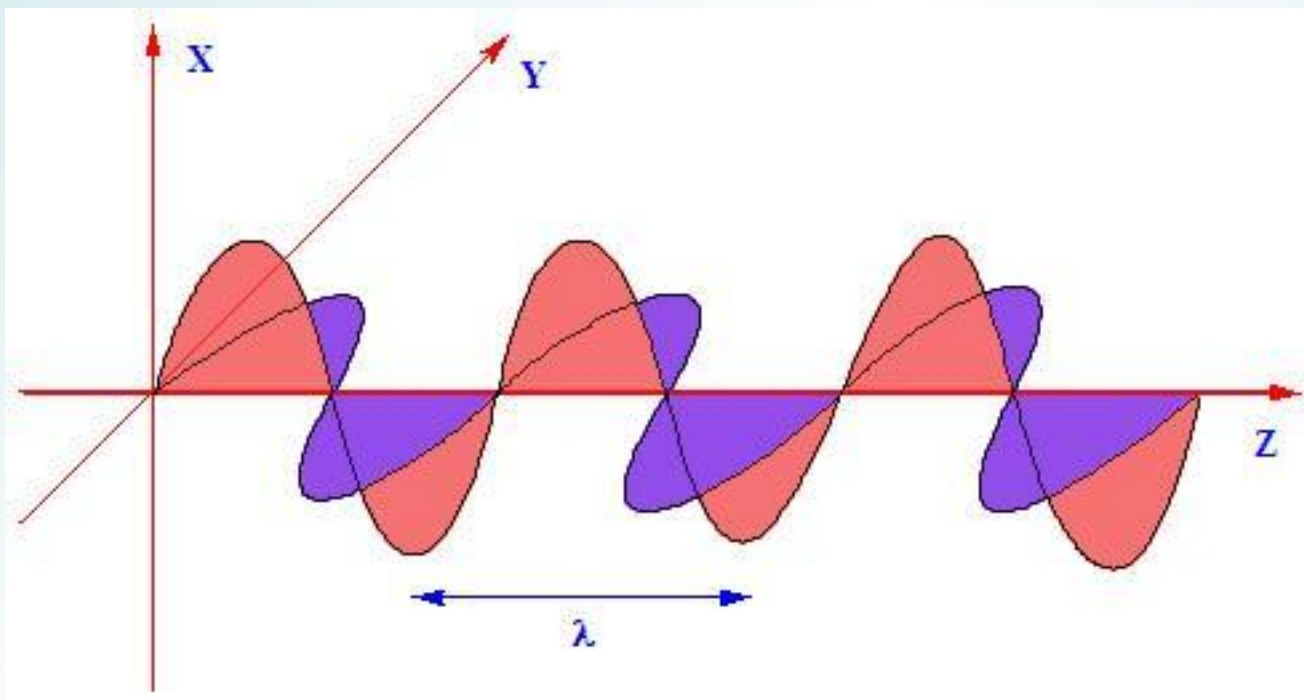


**СКАНУЮЧИЙ ЯДЕРНИЙ ЗОНД ІВТ**





# електромагнітні хвилі



$$v = c / \lambda$$

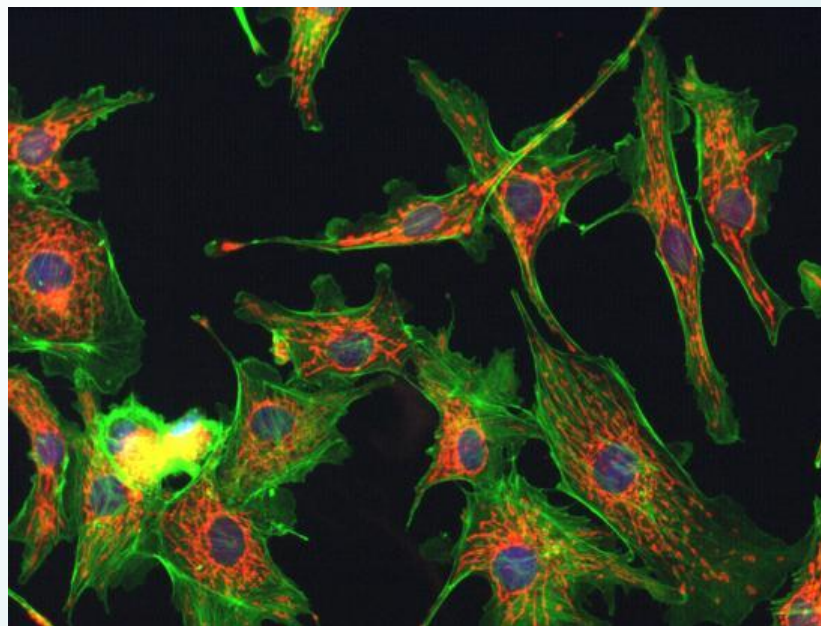


# взаємодія електромагнітного випромінювання з речовинами

## ОПТИЧНА МІКРОСКОПІЯ



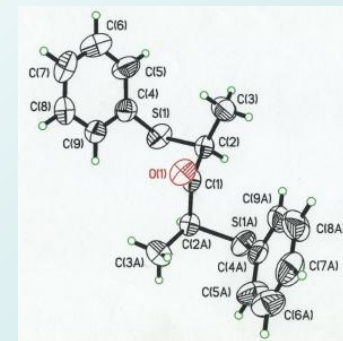
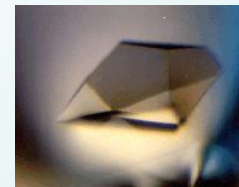
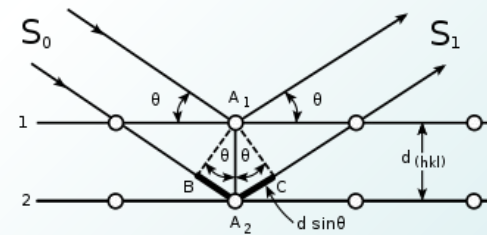
Leica DM IL LED Fluo





# взаємодія електромагнітного випромінювання з речовинами

## РЕНТГЕНОСТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ







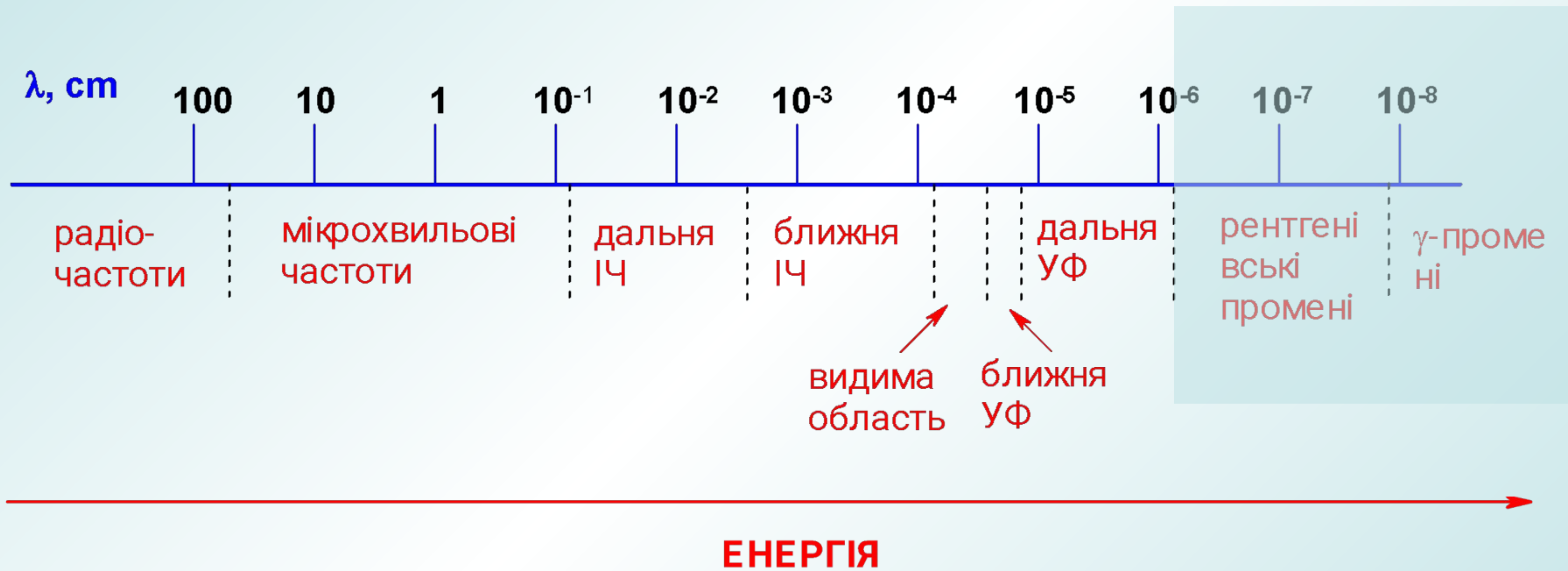
# СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

- ЩОБ ЕФЕКТИВНО ВІДБУВАЛАСЯ ВЗАЄМОДІЯ ВИПРОМІНЮВАННЯ З РЕЧОВИНОЮ, НЕОБХІДНЕ СПІВПАДАННЯ ЕНЕРГІЇ ВИПРОМІНЮВАННЯ З РІЗНИЦЕЮ ЕНЕРГІЙ ПЕВНИХ СТАНІВ МОЛЕКУЛ

$$\Delta E = h\nu = hc / \lambda$$



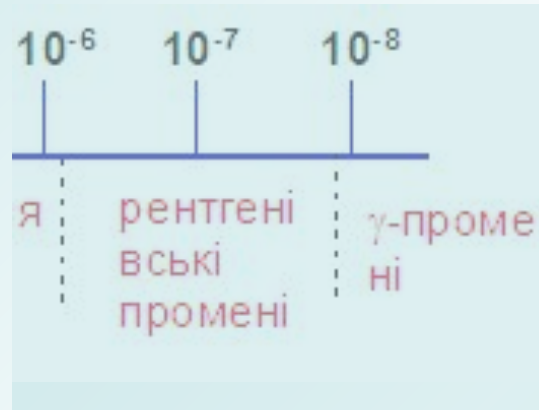
## ШКАЛА ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ВИПРОМІНЮВАНЬ





## СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

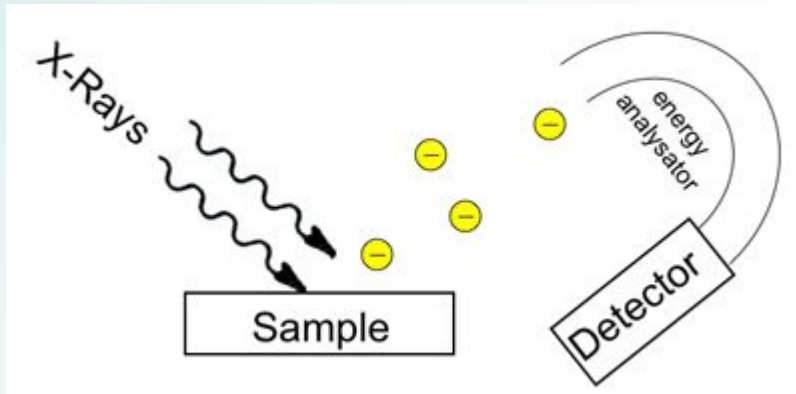
ЕЛЕКТРОНИ  
ВНУТРІШНІХ  
ЗОВНІШНІХ  
ЕЛЕКТРОННИХ  
ОБОЛОНОК



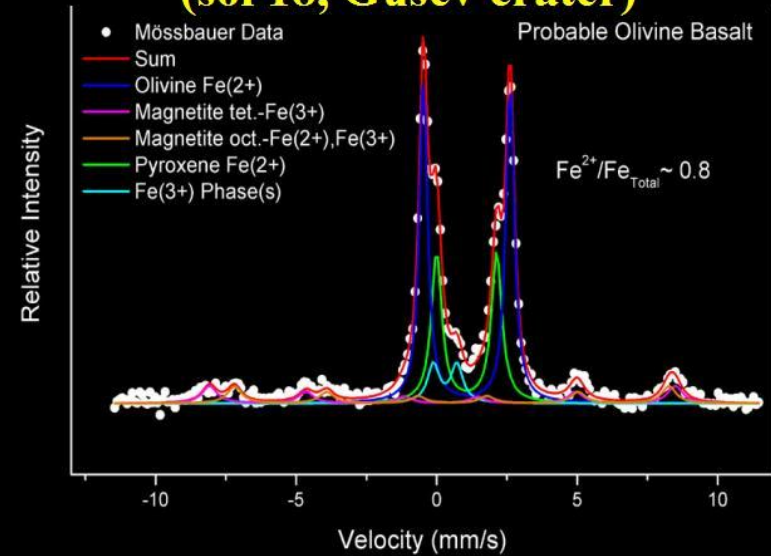
НУКЛОНІ В  
ЯДРАХ

γ-РЕЗОНАНСНА  
(МЕСБАУРІВСЬКА)  
СПЕКТРОСКОПІЯ

## ФОТОЕЛЕКТРОННА СПЕКТРОСКОПІЯ

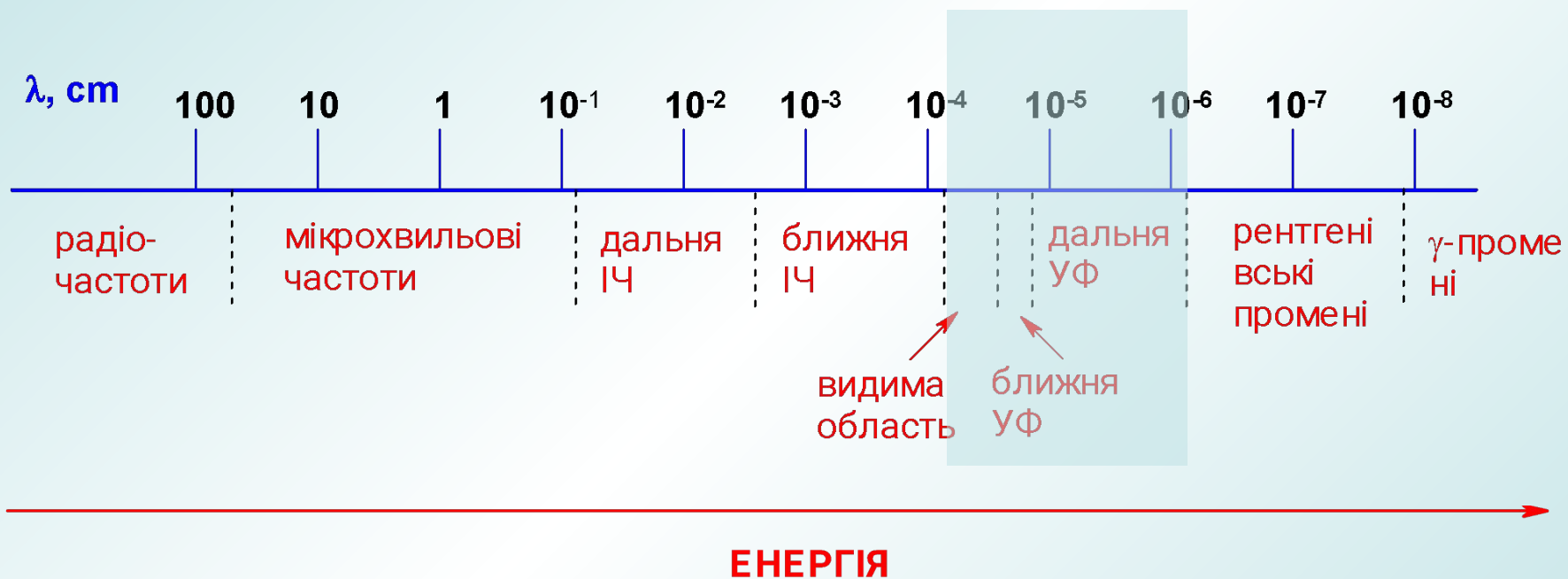


## Mössbauer Spectrum of Adirondack (sol 18, Gusev crater)





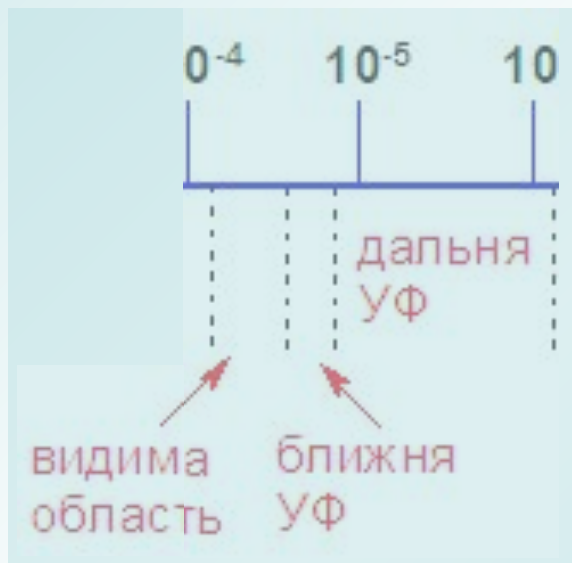
# СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ



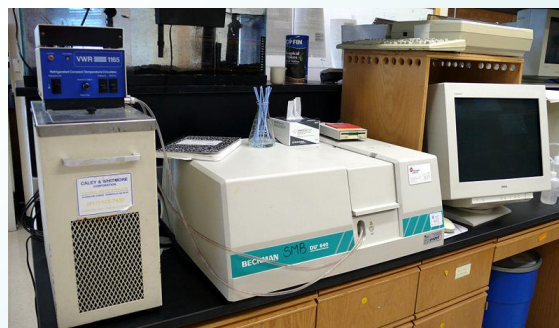


## СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

ЕЛЕКТРОНИ  
ЗОВНІШНІХ  
ЕЛЕКТРОННИХ  
ОБОЛОНОК

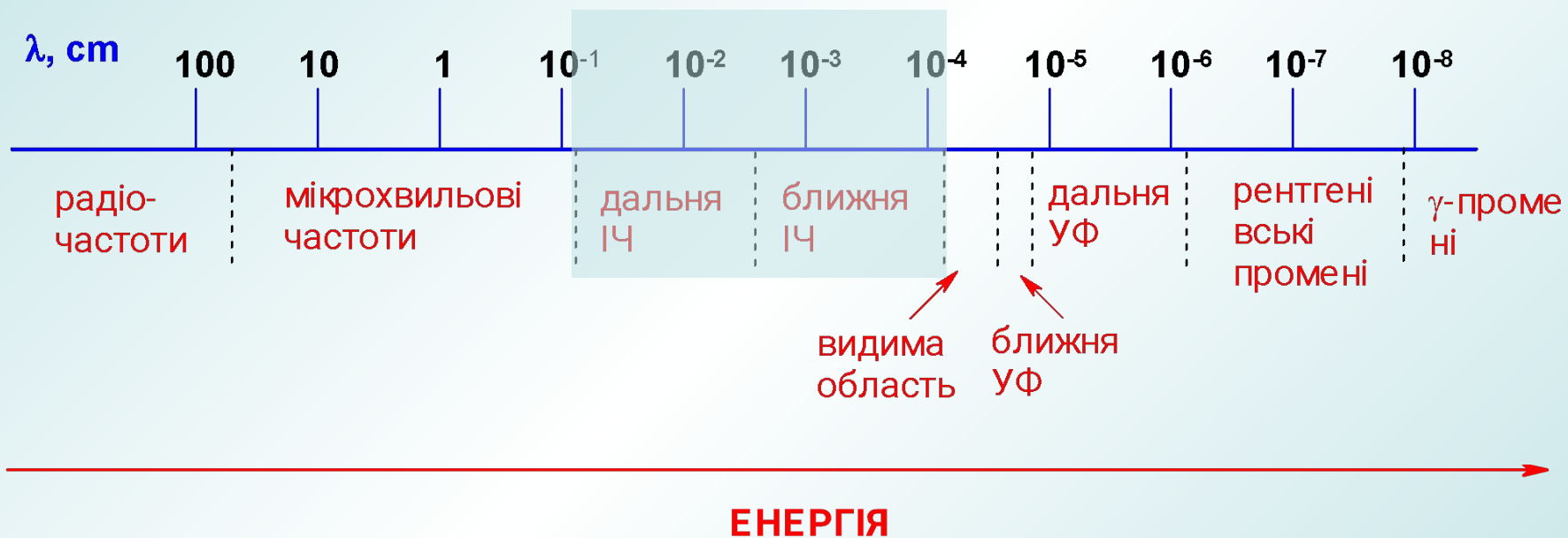


ЕЛЕКТРОННА  
СПЕКТРОСКОПІЯ  
(ВИДИМА І УФ)





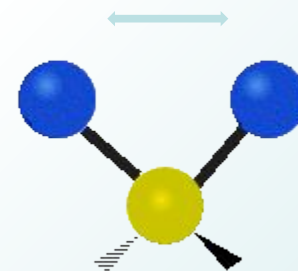
# СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ



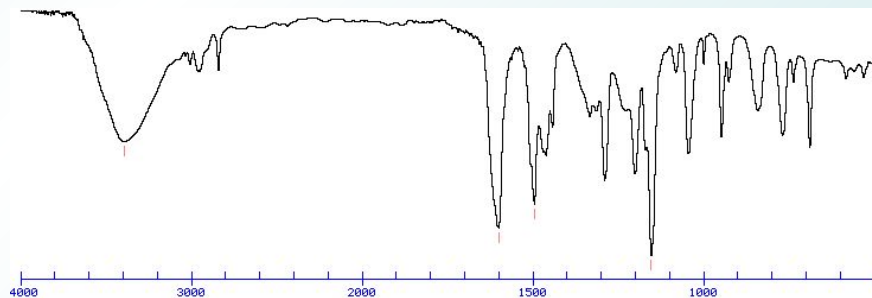


# СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

КОЛИВАЛЬНІ  
РІВНІ ЕНЕРГІЇ  
МОЛЕКУЛ



## ІНФРАЧЕРВОНА СПЕКТРОСКОПІЯ





## ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

**- ІЧ СПЕКТРОСКОПІЯ – ФІЗИЧНИЙ МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ, ЩО БАЗУЄТЬСЯ НА ВЗАЄМОДІЇ МОЛЕКУЛ РЕЧОВИН, ЩО ДОСЛІДЖУЮТЬСЯ З ІНФРАЧЕРВОНИМ (ТЕПЛОВИМ) ВИПРОМІНЮВАННЯМ.**

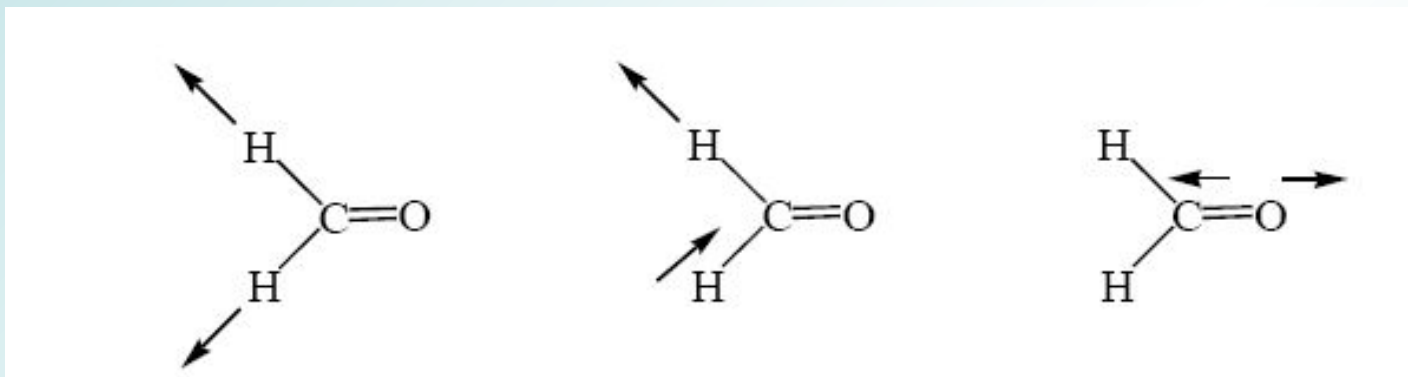
**- ІНФРАЧЕРВОНІ ПРОМЕНІ ВИКЛИКАЮТЬ ПЕРЕХОДИ МІЖ ОБЕРТАЛЬНИМИ ТА КОЛИВАЛЬНИМИ РІВНЯМИ МОЛЕКУЛ**





# ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

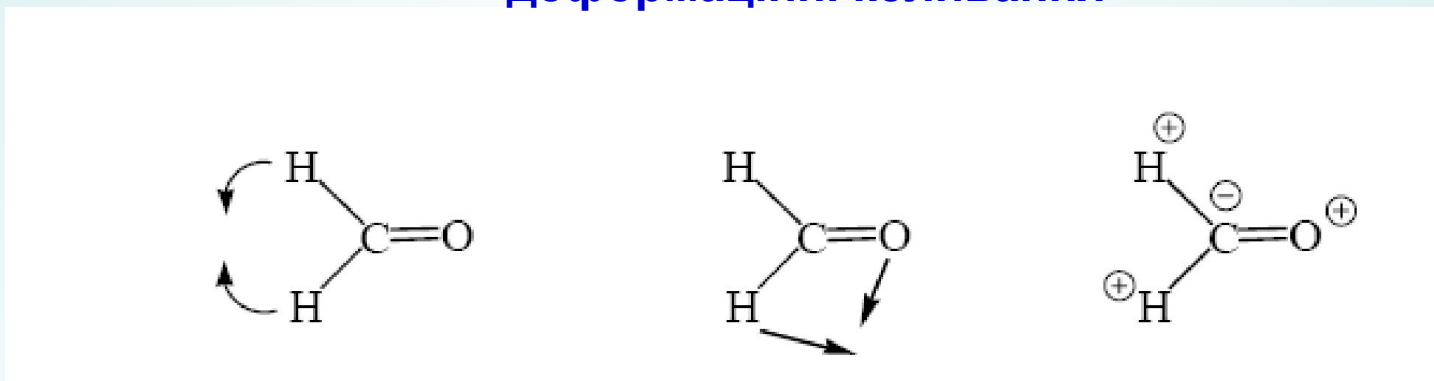
## валентні коливання



симетричні

асиметричні

## деформаційні коливання

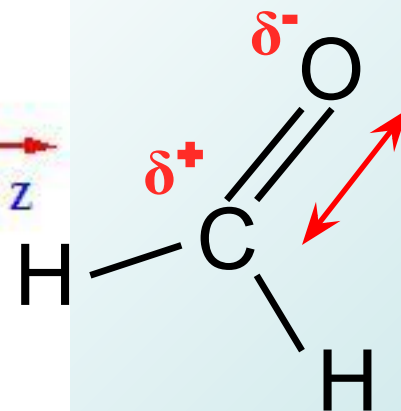
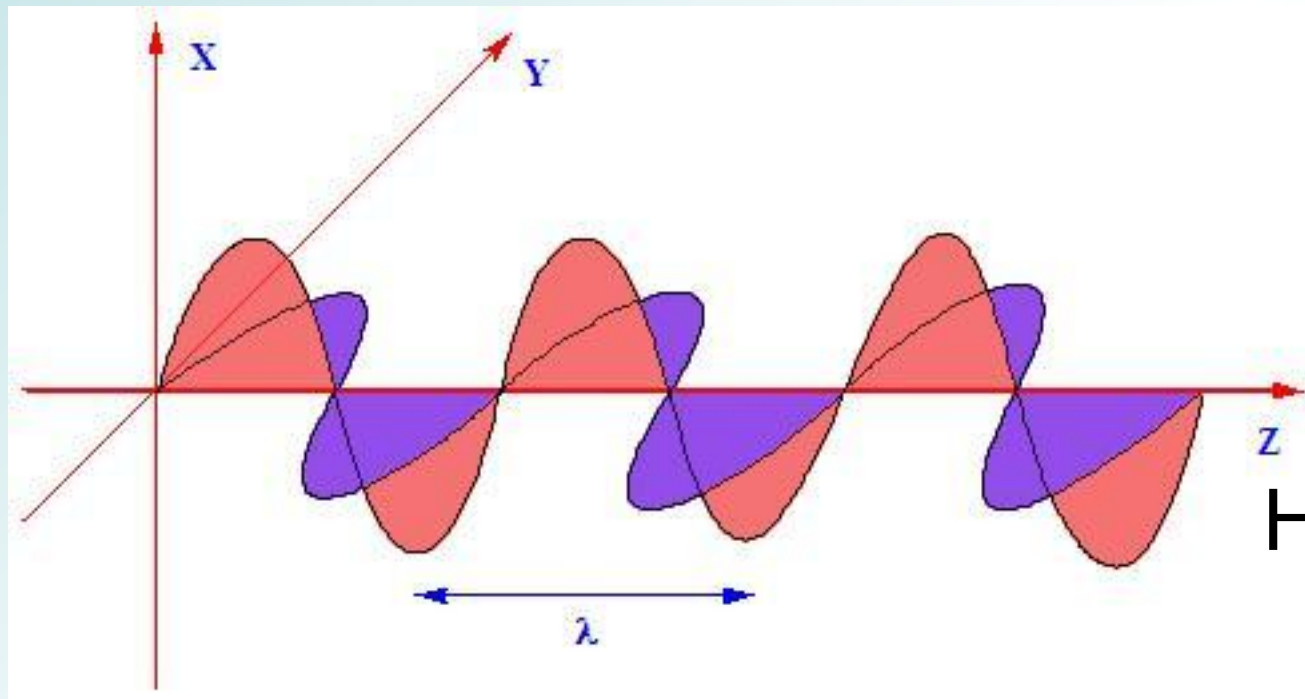


необхідною умовою є зміна дипольного моменту молекул в процесі коливань



# ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

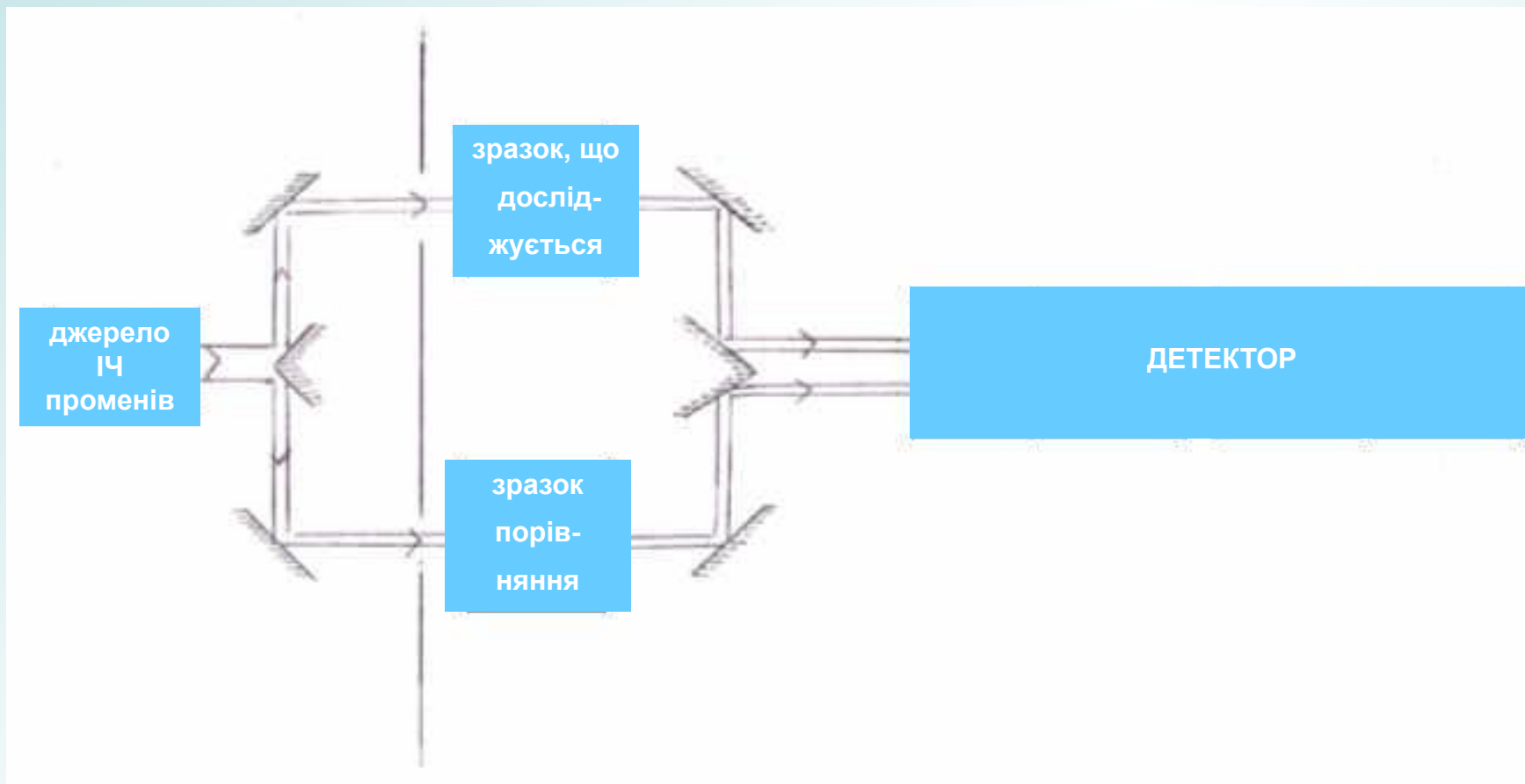
необхідною умовою є зміна дипольного моменту молекул в процесі коливань





# ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

## принципова схема приладу

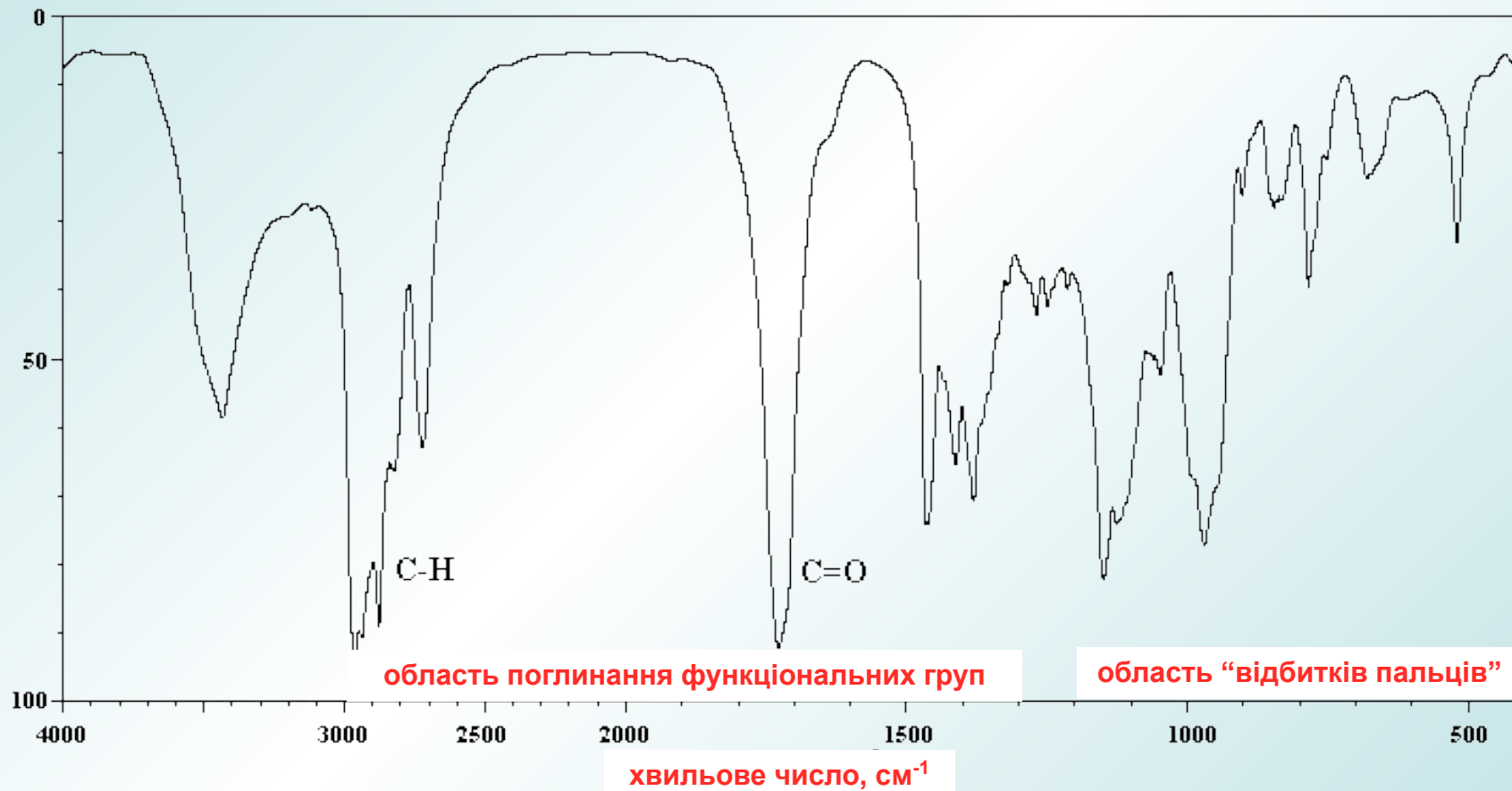




# ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

## типовий ІЧ-спектр

поглинання, %





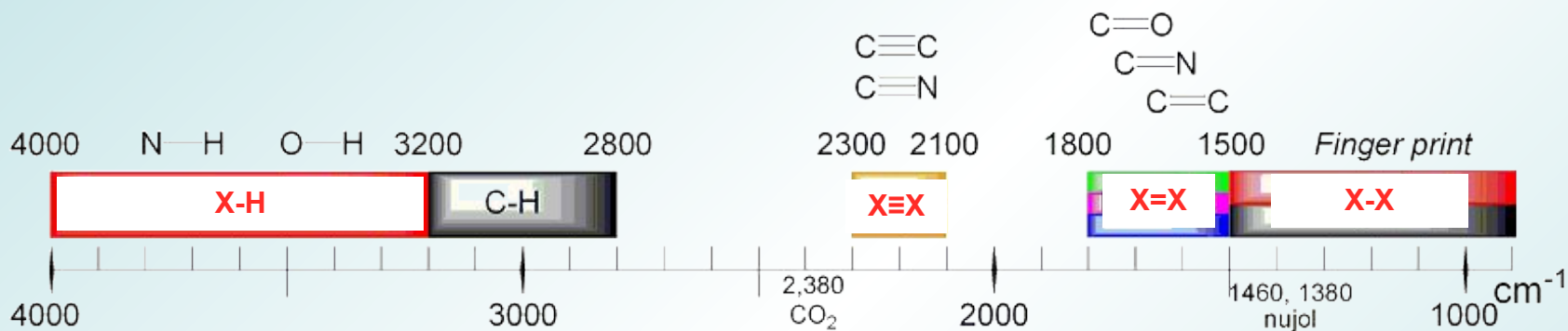
# ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

**- ЧАСТОТИ ПОГЛИНАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ГРУП Є  
ХАРАКТЕРИСТИЧНИМИ**



# ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

## поглинання функціональних груп

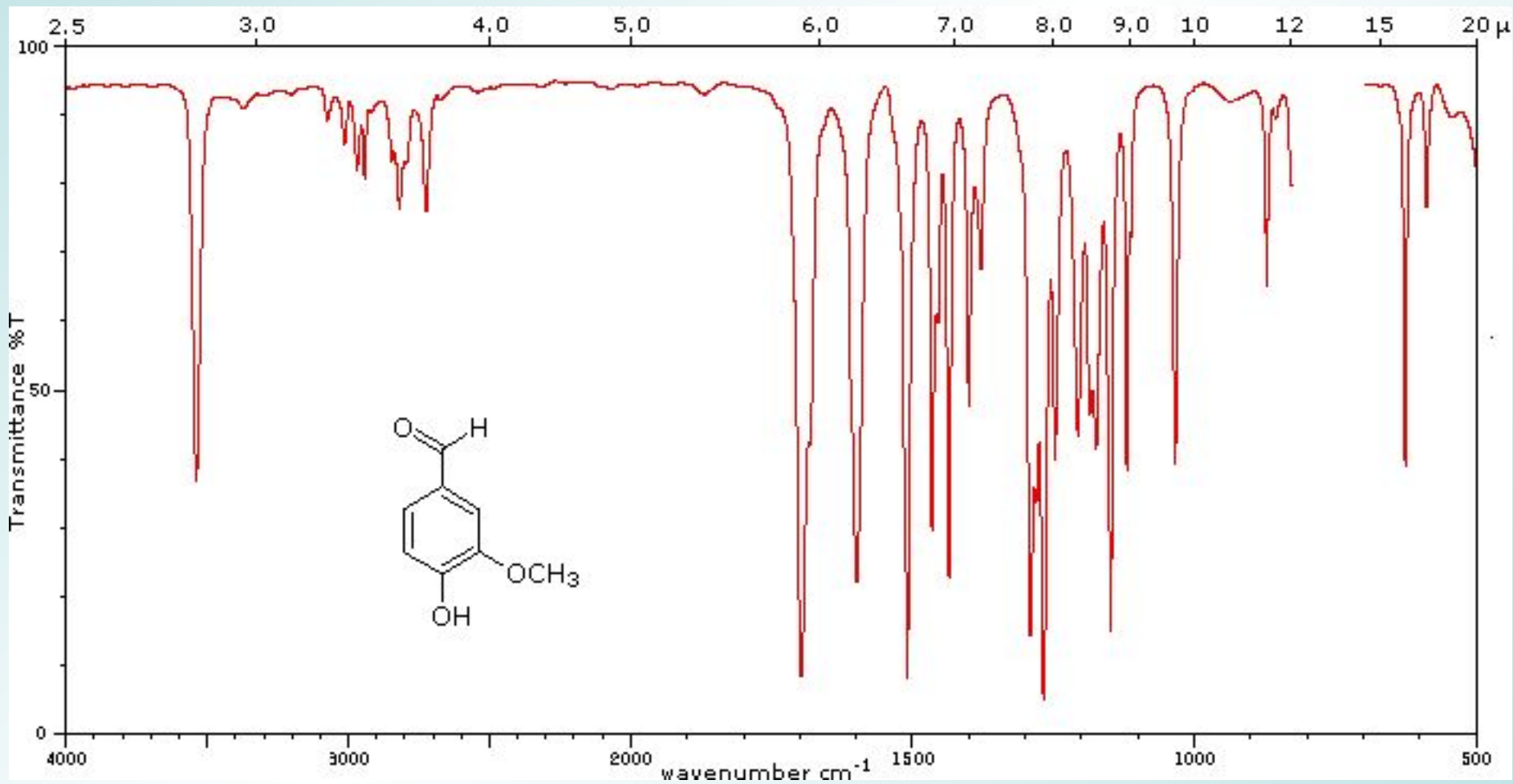


### Double Bonds

Bond	Wavenumber/cm <sup>-1</sup>	Notes
C=O	1840 – 1800 & 1780 – 1740	Anhydrides
C=O	1815 – 1760	Acyl halides
C=O	1750 – 1715	Esters
C=O	1740 – 1680	Aldehydes
C=O	1725 – 1665	Ketones
C=O	1720 – 1670	Carboxylic acids
C=O	1690 – 1630	Amides
C=C	1675 – 1600	Often weak
C=N	1690 – 1630	Often difficult to assign
N=O	1560 – 1510 & 1370 – 1330	Nitro compounds

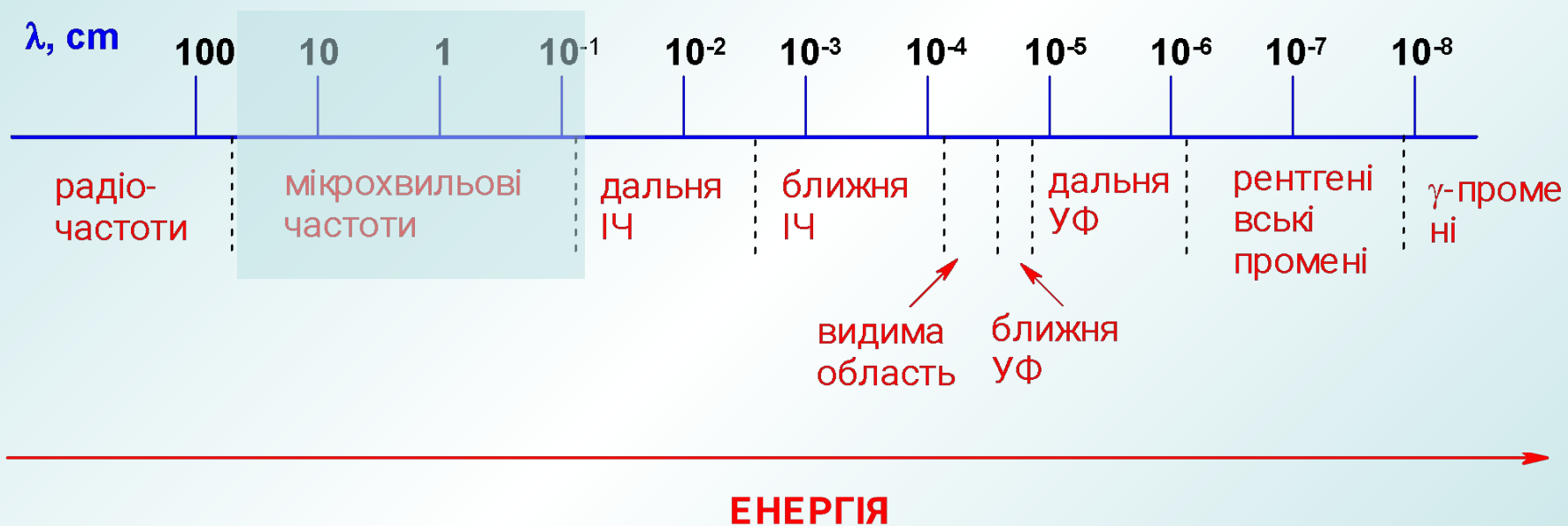


# ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ





# СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

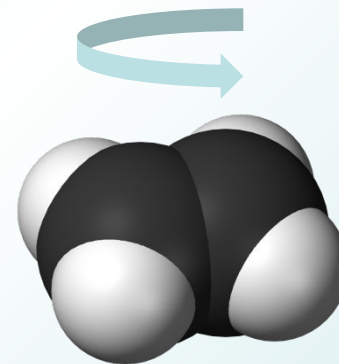
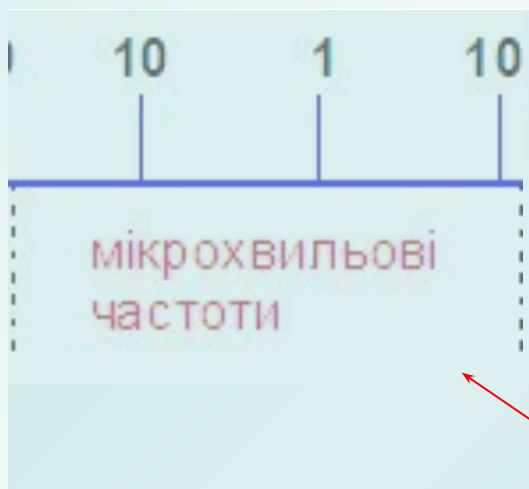






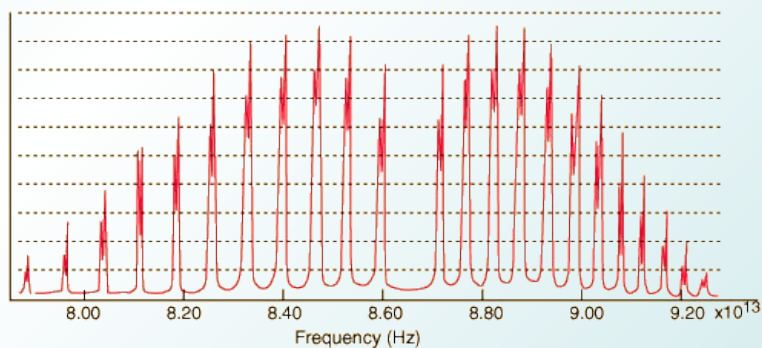
# СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

ОБЕРТАЛЬНІ  
РІВНІ ЕНЕРГІЇ  
МОЛЕКУЛ



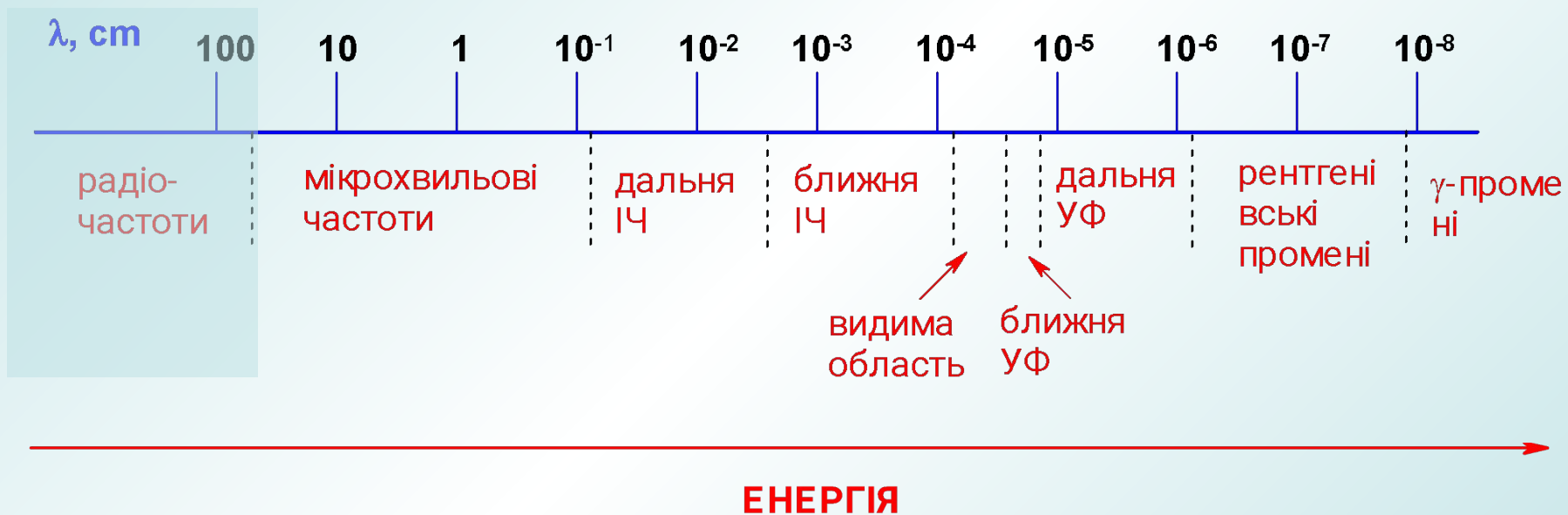
МІКРОХВИЛЬОВА  
(ОБЕРТАЛЬНА)  
СПЕКТРОСКОПІЯ

ТГц спектроскопія





# СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

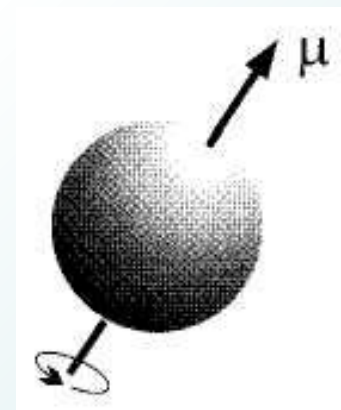




## СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

РІВНІ ЕНЕРГІЇ  
ЕЛЕКТРОНІВ І  
ЯДЕР

МАГНІТНІ  
СТАНИ



ЯДЕРНИЙ МАГНІТНИЙ РЕЗОНАНС ТА ЕЛЕКТРОННИЙ  
ПАРАМАГНІТНИЙ РЕЗОНАНС





# ПРЯМА ТА ОБЕРНЕНА СПЕКТРАЛЬНІ ЗАДАЧІ

ЯМР  $^1\text{H}$ , 200 МГц

R #05

