

# СТРАТЕГІЇ ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНИХ СПОЛУК З ВИКОРИСТАННЯМ СУЧАСНИХ ФІЗИЧНИХ МЕТОДІВ

Частина перша

## ПИТАННЯ, ЩО ПОСТАЮТЬ ПЕРЕД ХІМІКАМИ ПРИ ВИВЧЕННІ НЕВІДОМИХ ХІМІЧНИХ СПОЛУК

- ЯКИЙ СКЛАД (БРУТТО-ФОРМУЛУ) МАЄ СПОЛУКА?
- ЯКІ ФУНКЦІОНАЛЬНІ ГРУПИ (СТРУКТУРНІ ФРАГМЕНТИ) МАЄ МОЛЕКУЛА?
- ЯКОЮ Є МОЛЕКУЛЯРНА ТОПОЛОГІЯ (ПОСЛІДОВНІСТЬ ХІМІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ)?
- ЯКОЮ Є ПРОСТОРОВА БУДОВА МОЛЕКУЛ СПОЛУКИ, ЩО ДОСЛІДЖУЄТЬСЯ?
- ДЕТАЛІ БУДОВИ: ЧИ НАЯВНІ В МОЛЕКУЛІ ВОДНЕВІ ЗВ'ЯЗКИ, В ЯКІЙ ТАУТОМЕРНІЙ ФОРМІ ІСНУЄ СПОЛУКА І Т.П.?
- ЯКОЮ Є ВНУТРІШНЬО- І МІЖМОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА МОЛЕКУЛ СПОЛУКИ?
- ЯКІ ФІЗИЧНІ І ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МАЄ СПОЛУКА?
- ЧИ МОЖЕ СПОЛУКА УТВОРЮВАТИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНІ КОМПЛЕКСИ, АСОЦІАТИ І Т.П.?

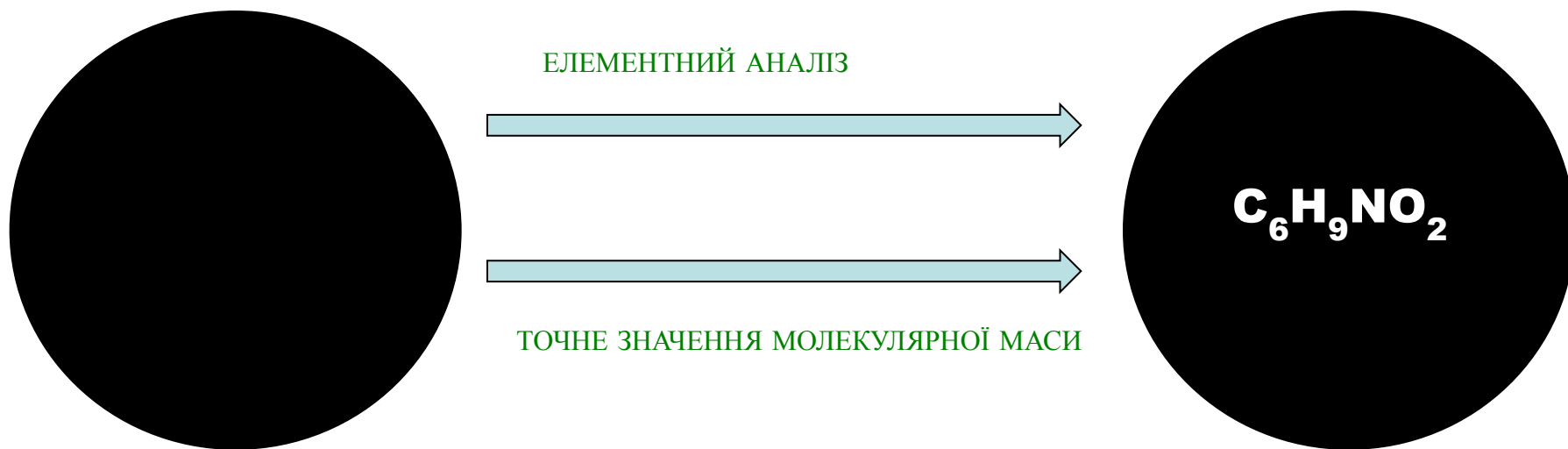
## ПИТАННЯ, ЩО ПОСТАЮТЬ ПЕРЕД ХІМІКАМИ ПРИ ВИВЧЕННІ НЕВІДОМИХ ХІМІЧНИХ СПОЛУК

- ЯКИЙ СКЛАД (БРУТТО-ФОРМУЛУ) МАЄ СПОЛУКА?
- ЯКІ ФУНКЦІОНАЛЬНІ ГРУПИ (СТРУКТУРНІ ФРАГМЕНТИ) МАЄ МОЛЕКУЛА?
- ЯКОЮ Є МОЛЕКУЛЯРНА ТОПОЛОГІЯ (ПОСЛІДОВНІСТЬ ХІМІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ)?
- ЯКОЮ Є ПРОСТОРОВА БУДОВА МОЛЕКУЛ СПОЛУКИ, ЩО ДОСЛІДЖУЄТЬСЯ?
- ДЕТАЛІ БУДОВИ: ЧИ НАЯВНІ В МОЛЕКУЛІ ВОДНЕВІ ЗВ'ЯЗКИ, В ЯКІЙ ТАУТОМЕРНІЙ ФОРМІ ІСНУЄ СПОЛУКА І Т.П.?
- ЯКОЮ Є ВНУТРІШНЬО- І МІЖМОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА МОЛЕКУЛ СПОЛУКИ?
- ЯКІ ФІЗИЧНІ І ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МАЄ СПОЛУКА?
- ЧИ МОЖЕ СПОЛУКА УТВОРЮВАТИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНІ КОМПЛЕКСИ, АСОЦІАТИ І Т.П.?

- ЯКИЙ СКЛАД (БРУТТО-ФОРМУЛУ) МАЄ СПЛУКА?

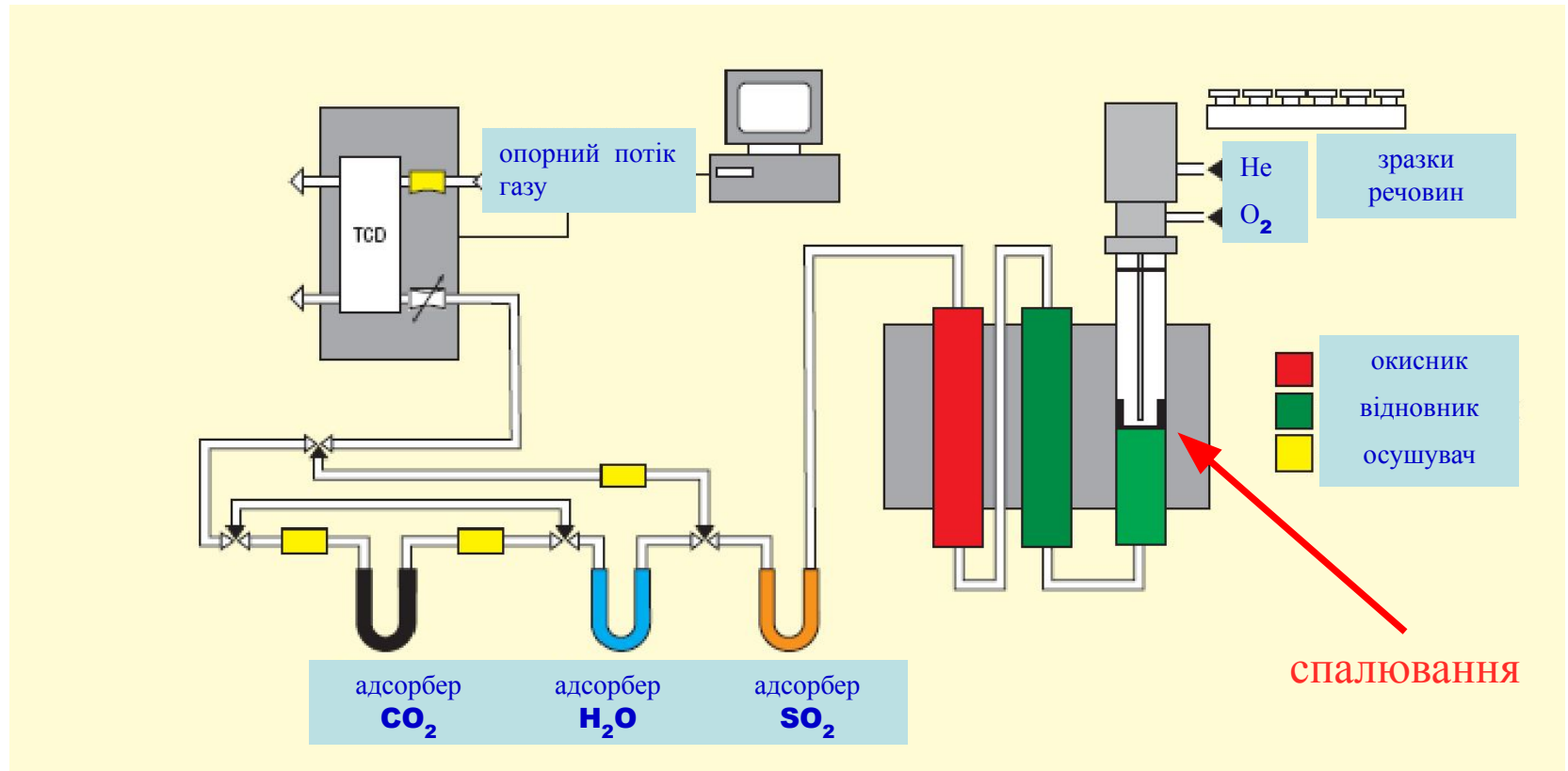
- Чи є сполука індивідуальною?

- Які гіпотези щодо складу і будови сполуки можна зробити, виходячи зі схеми синтезу чи інших попередніх даних?

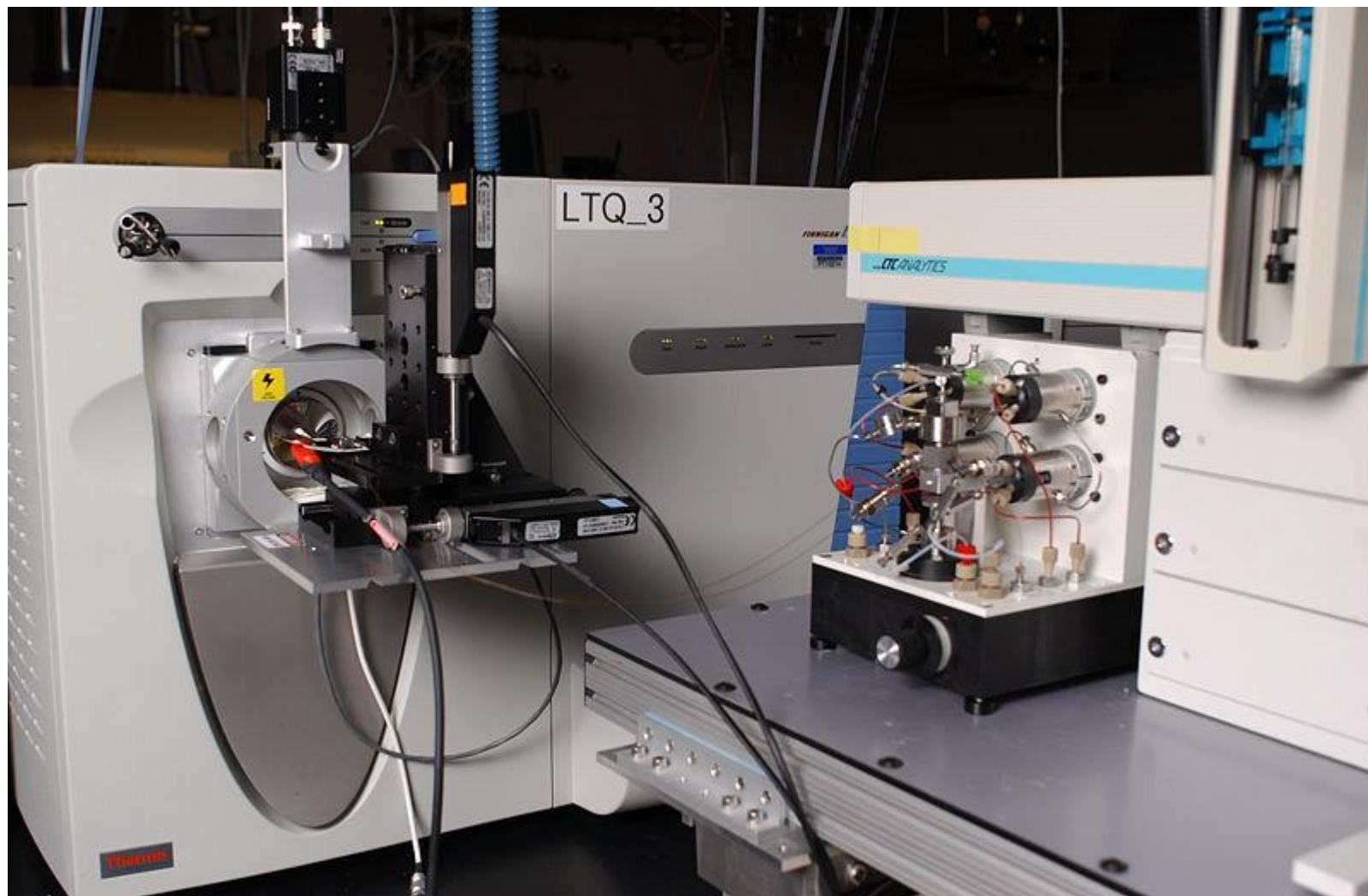


# КІЛЬКІСНИЙ ЕЛЕМЕНТНИЙ АНАЛІЗ

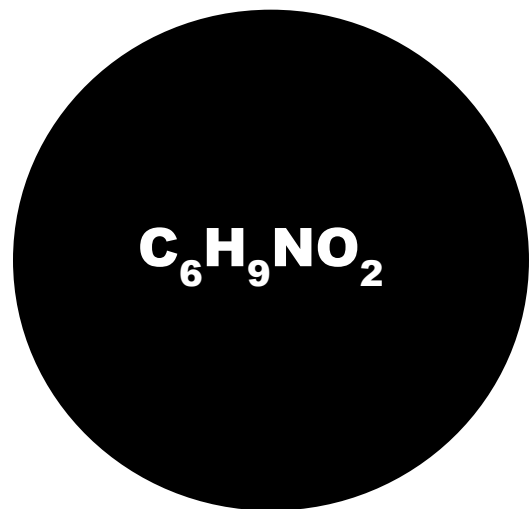
БАЗУЄТЬСЯ НА РЕАКЦІЇ СПАЛЮВАННЯ СПЛУК, ЩО ДОСЛІДЖУЮТЬСЯ



# ΧΡΟΜΑΤΟ-ΜΑΣ ΣΠΕΚΤΡΟΜΕΤΡ



- ЯКІ ФУНКЦІОНАЛЬНІ ГРУПИ (СТРУКТУРНІ ФРАГМЕНТИ) МАЄ МОЛЕКУЛА?



ІЧ СПЕКТР



МАС-СПЕКТР



УФ-СПЕКТР



АНАЛІЗ ХІМІЧНИХ ЗСУВІВ В  
“РУТИННИХ”  $^1H$ - ТА  $^{13}C$ -ЯМР-  
СПЕКТРАХ, **DEPT/INEPT**



- ЯКОЮ Є МОЛЕКУЛЯРНА ТОПОЛОГІЯ  
(ПОСЛІДОВНІСТЬ ХІМІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ)?

АНАЛІЗ ПРОТОННИХ ТА  $^{13}\text{C}$   
МУЛЬТИПЛЕТІВ



**DEPT/INEPT**



НН- ТА СН-**COSY, TOCSY, (HSQC)**, ІНШІ  
ПРОТОН-ГЕТЕРОЯДЕРНІ КОРЕЛЯЦІЇ



**HMBC**



**INADEQUATE**

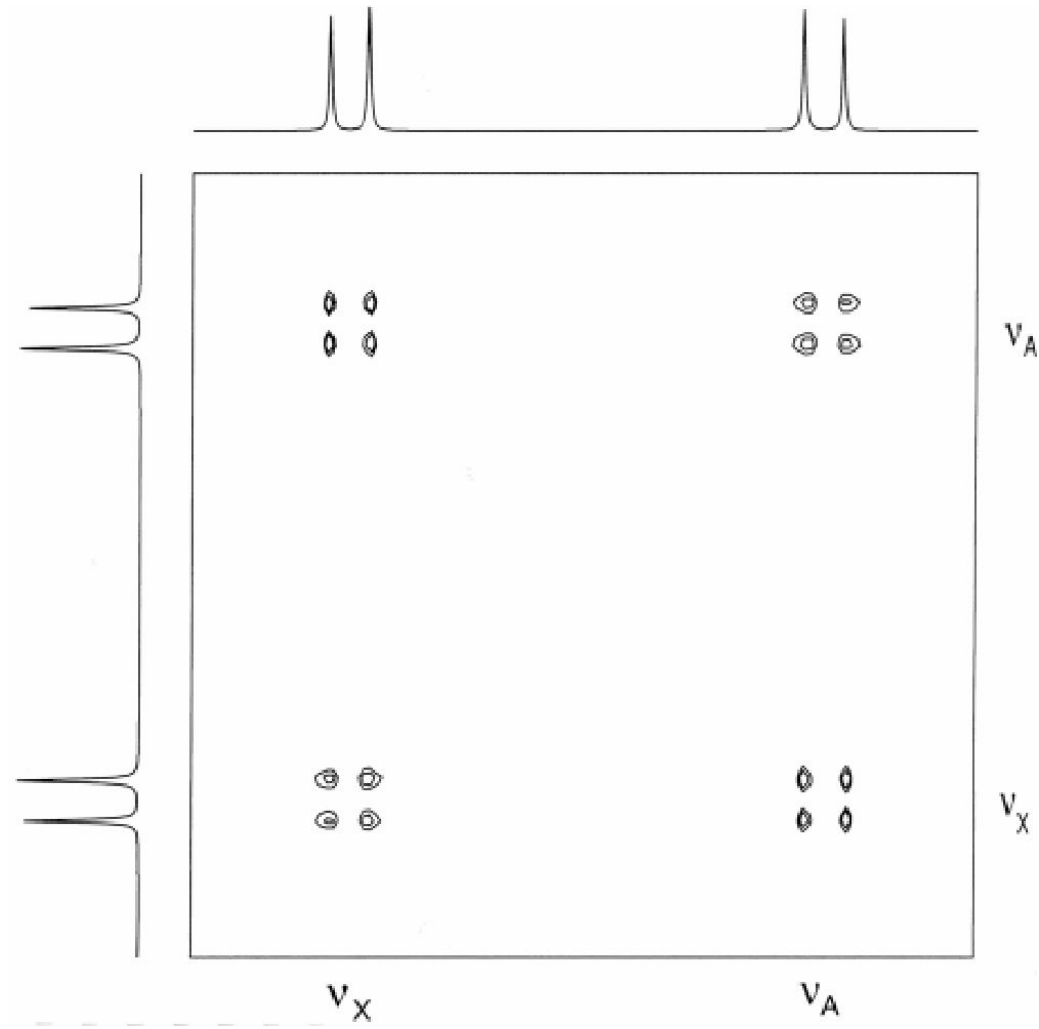


Фрагменти: **NH**  
**CHCOOH**,  
**2xCH**, **2xCH<sub>2</sub>**

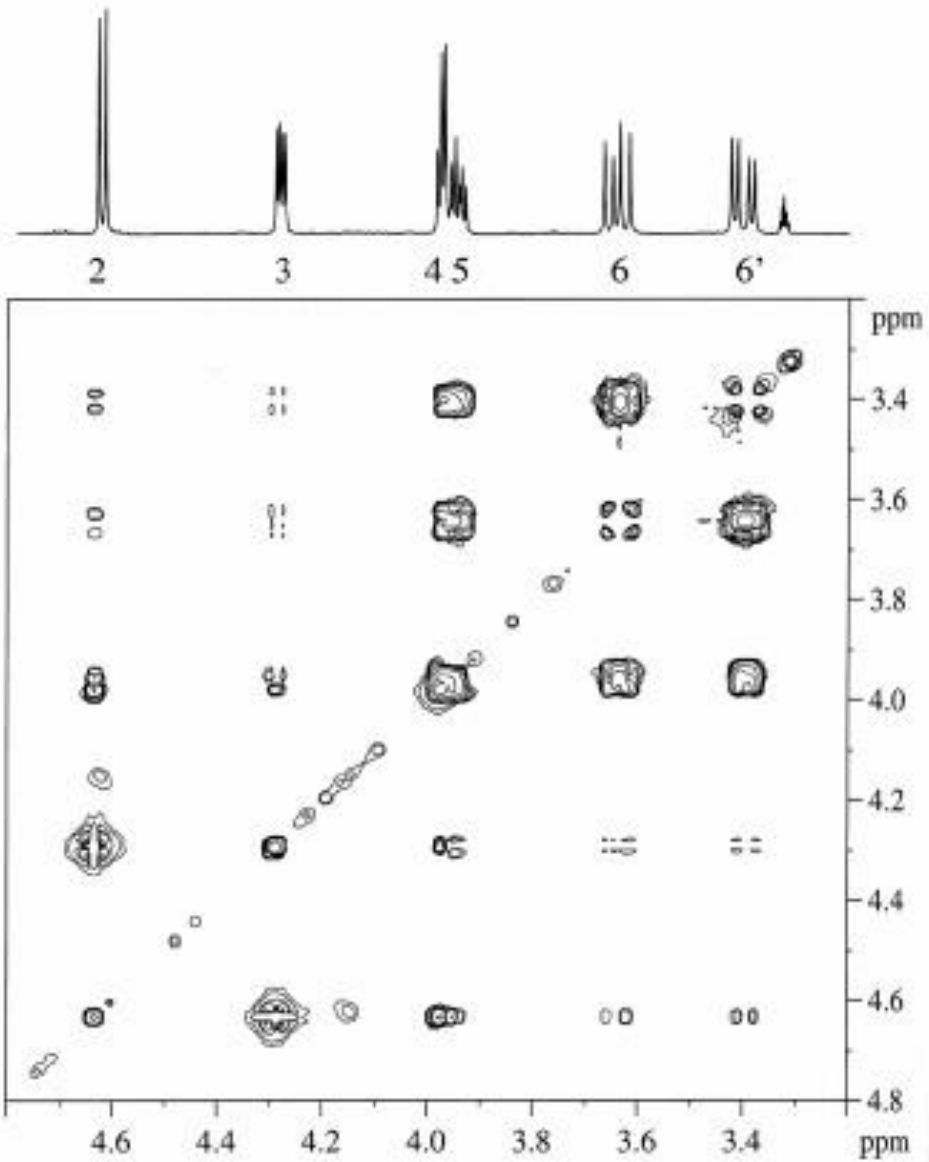
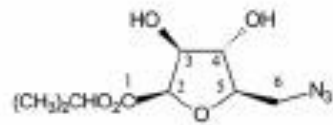




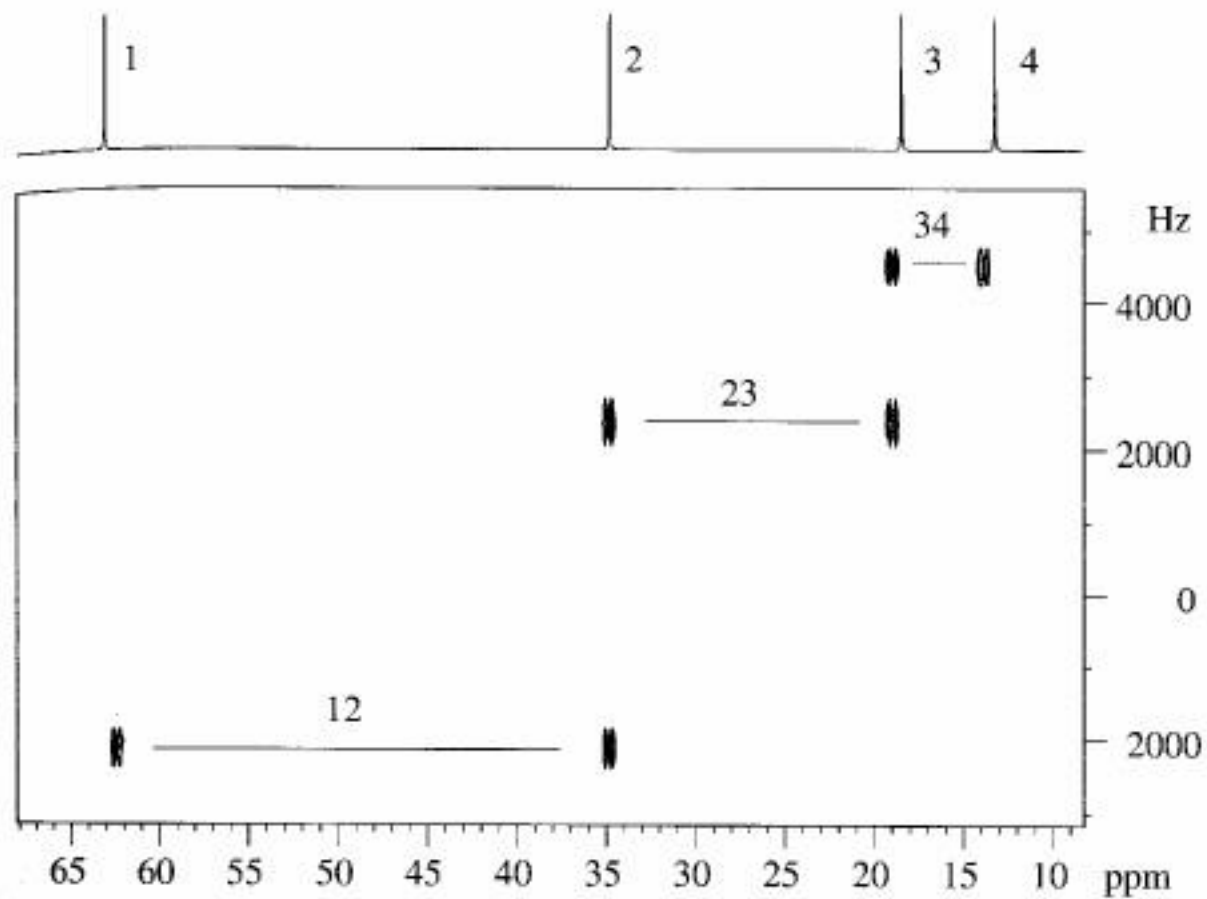
# COSY



# TOCSY



# INADEQUATE



- ЯКОЮ Є ПРОСТОРОВА БУДОВА МОЛЕКУЛ СПОЛУКИ,  
ЩО ДОСЛІДЖУЄТЬСЯ?

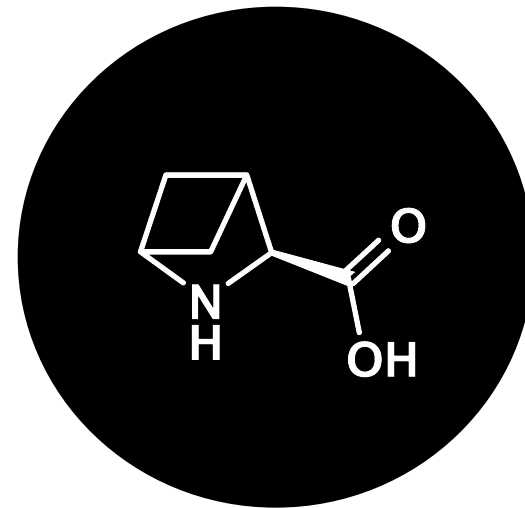
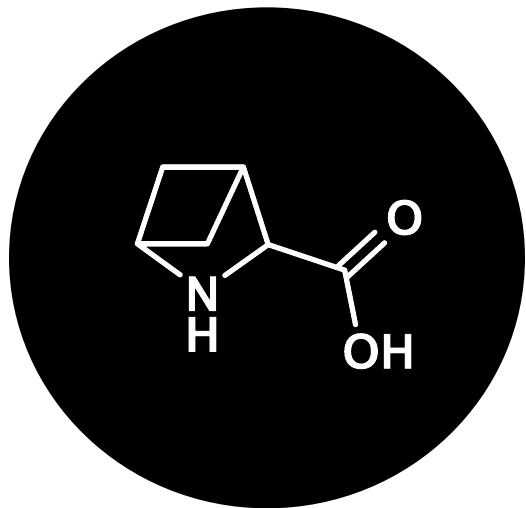
АНАЛІЗ С-Н, С-С, ТА ІНШИХ  
КССВ



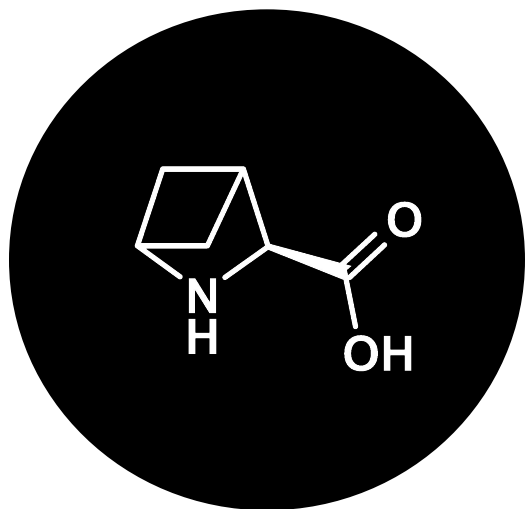
**1D- ТА 2D-NOE (NOESY)**



ЗСУВАЮЧІ РЕАГЕНТИ



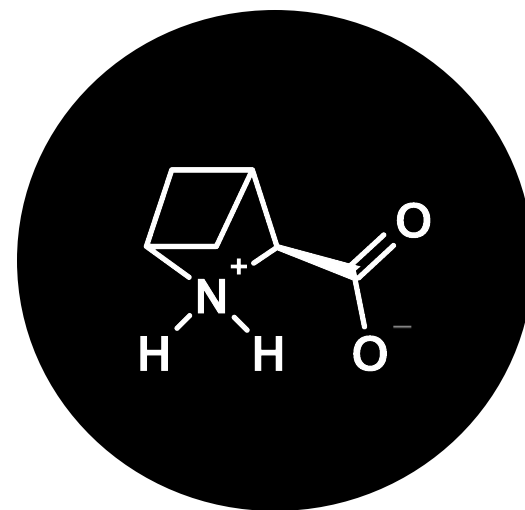
- ДЕТАЛІ БУДОВИ: ЧИ НАЯВНІ В МОЛЕКУЛІ ВОДНЕВІ ЗВ'ЯЗКИ, В ЯКІЙ ТАУТОМЕРНІЙ ФОРМІ ІСНУЄ СПОЛУКА І Т.П.?



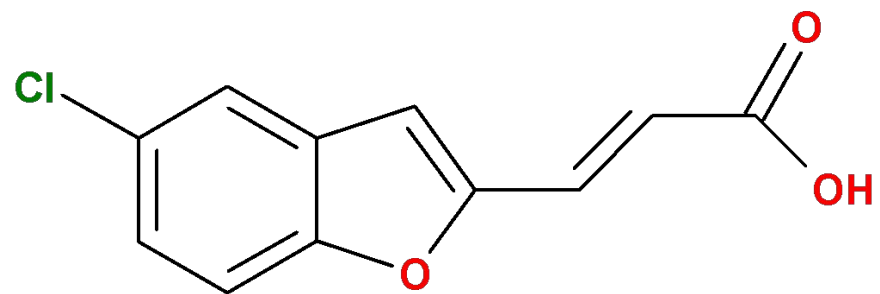
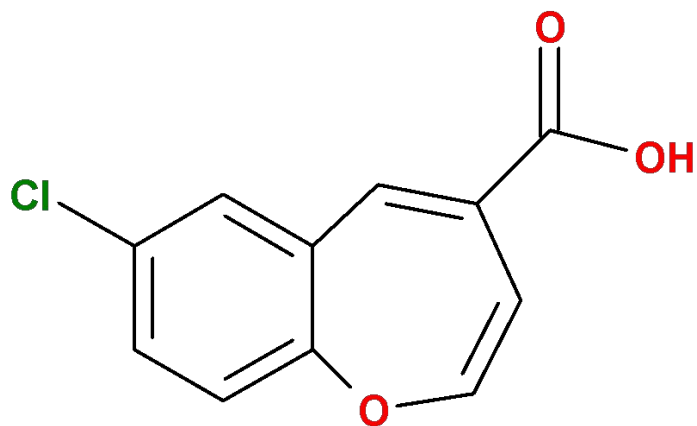
ДЕТАЛЬНИЙ АНАЛІЗ ІЧ ТА  
ЯМР-СПЕКТРІВ



ЕЛЕКТРОННА  
СПЕКТРОСКОПІЯ



ПРИКЛАД 1  
( $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ -ЯМР, DEPT)



# ПРИКЛАД 1 (<sup>1</sup>H-ЯМР)

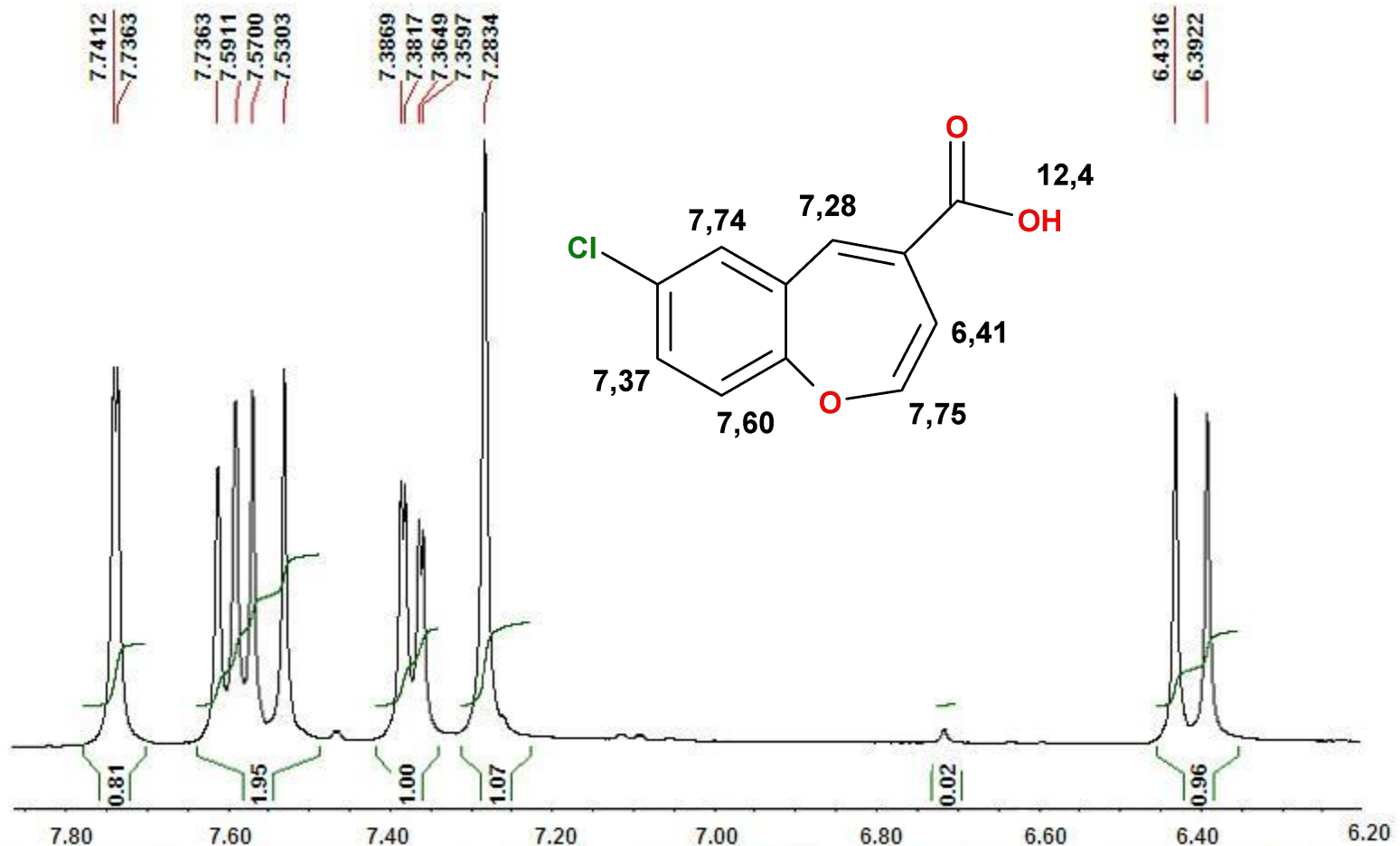


Рис. 1. Спектр <sup>1</sup>H сполуки 1 (розчинник – ДМСО-D<sub>6</sub>, робоча частота спектрометра ( $\nu_{\text{спектрометра}}$ ) складає 400 МГц для протонів). Показана лише інформативна частина спектру. Окрім зображених сигналів, в спектрі міститься також уширений сигнал карбоксильної групи при 12,4 м.ч.

# ПРИКЛАД 1 (<sup>1</sup>H-ЯМР)

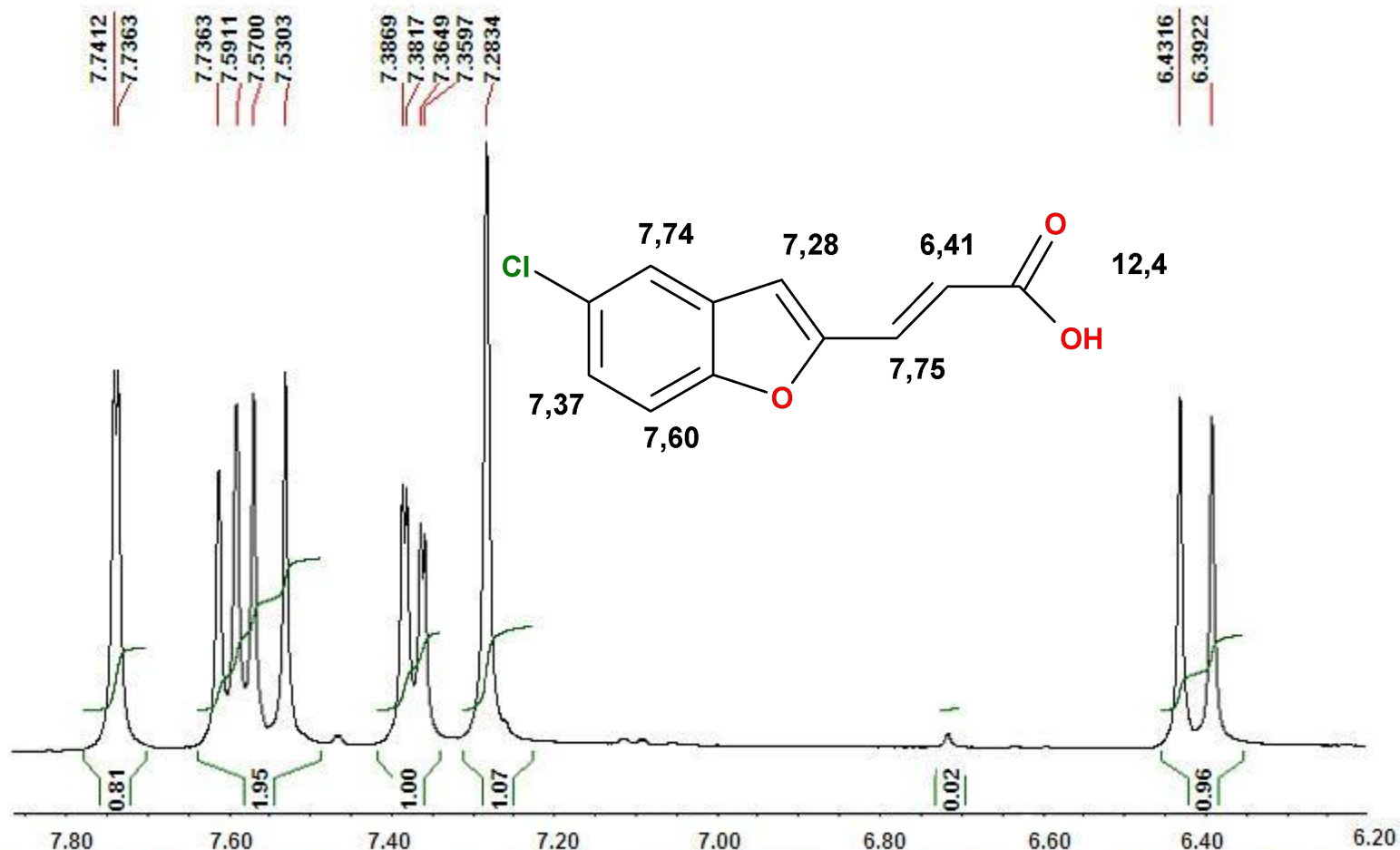
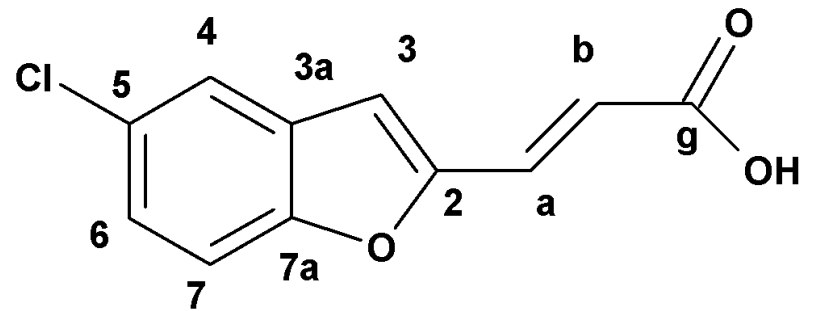
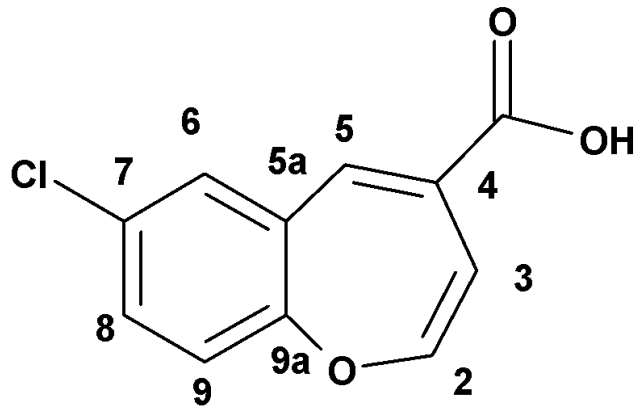


Рис. 1. Спектр <sup>1</sup>H сполуки 1 (розчинник – ДМСО-D<sub>6</sub>, робоча частота спектрометра ( $\nu_{\text{спектрометра}}$ ) складає 400 МГц для протонів). Показана лише інформативна частина спектру. Окрім зображених сигналів, в спектрі міститься також уширений сигнал карбоксильної групи при 12,4 м.ч.



ПРИКЛАД 1  
(<sup>13</sup>C-ЯМР)



# ПРИКЛАД 1 (<sup>13</sup>C-ЯМР)

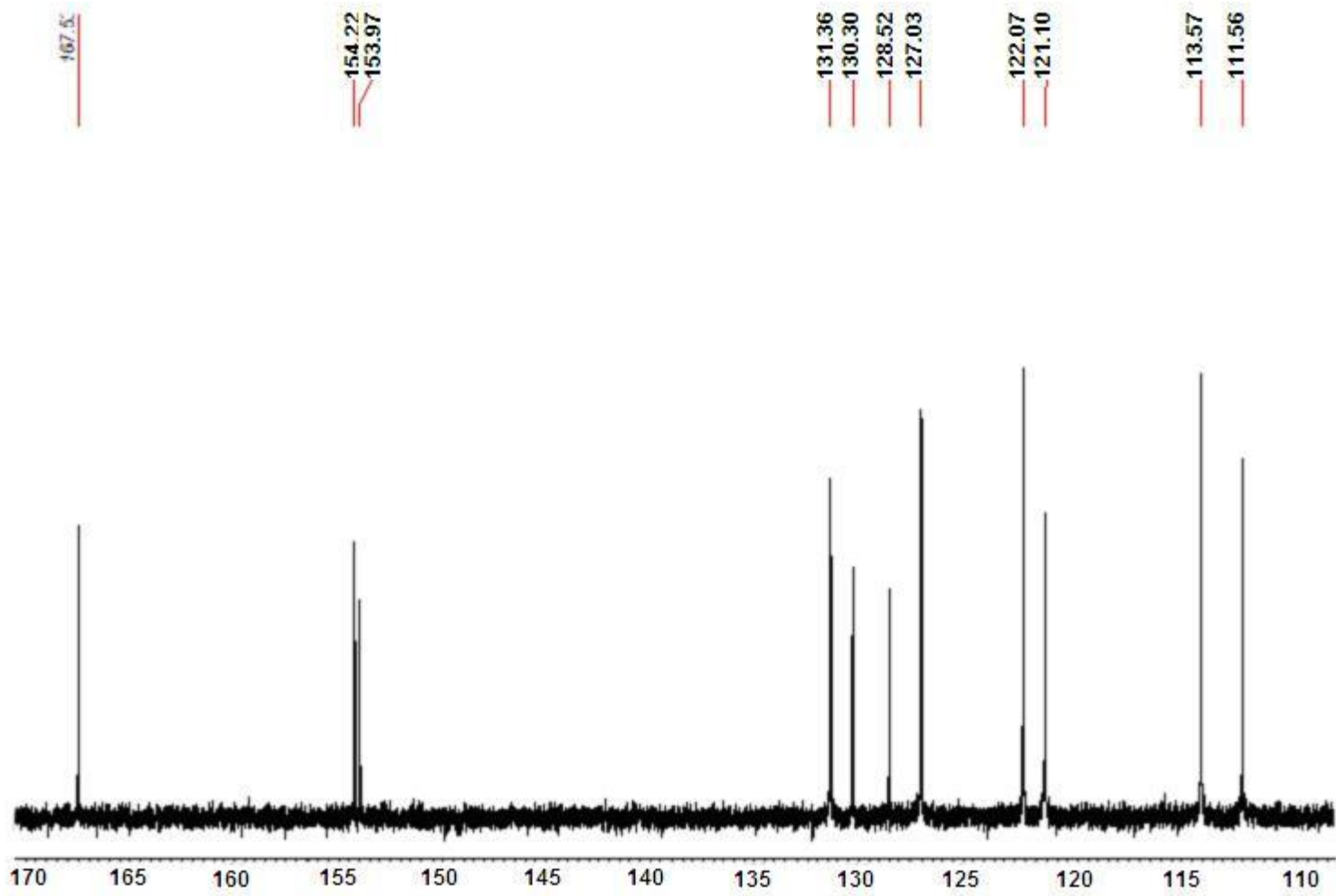


Рис. 2. Спектр <sup>13</sup>C сполуки 1, знятий в умовах розв'язки ССВ з протонами (розчинник – ДМСО-D<sub>6</sub>).

## ПРИКЛАД 1 (DEPT)

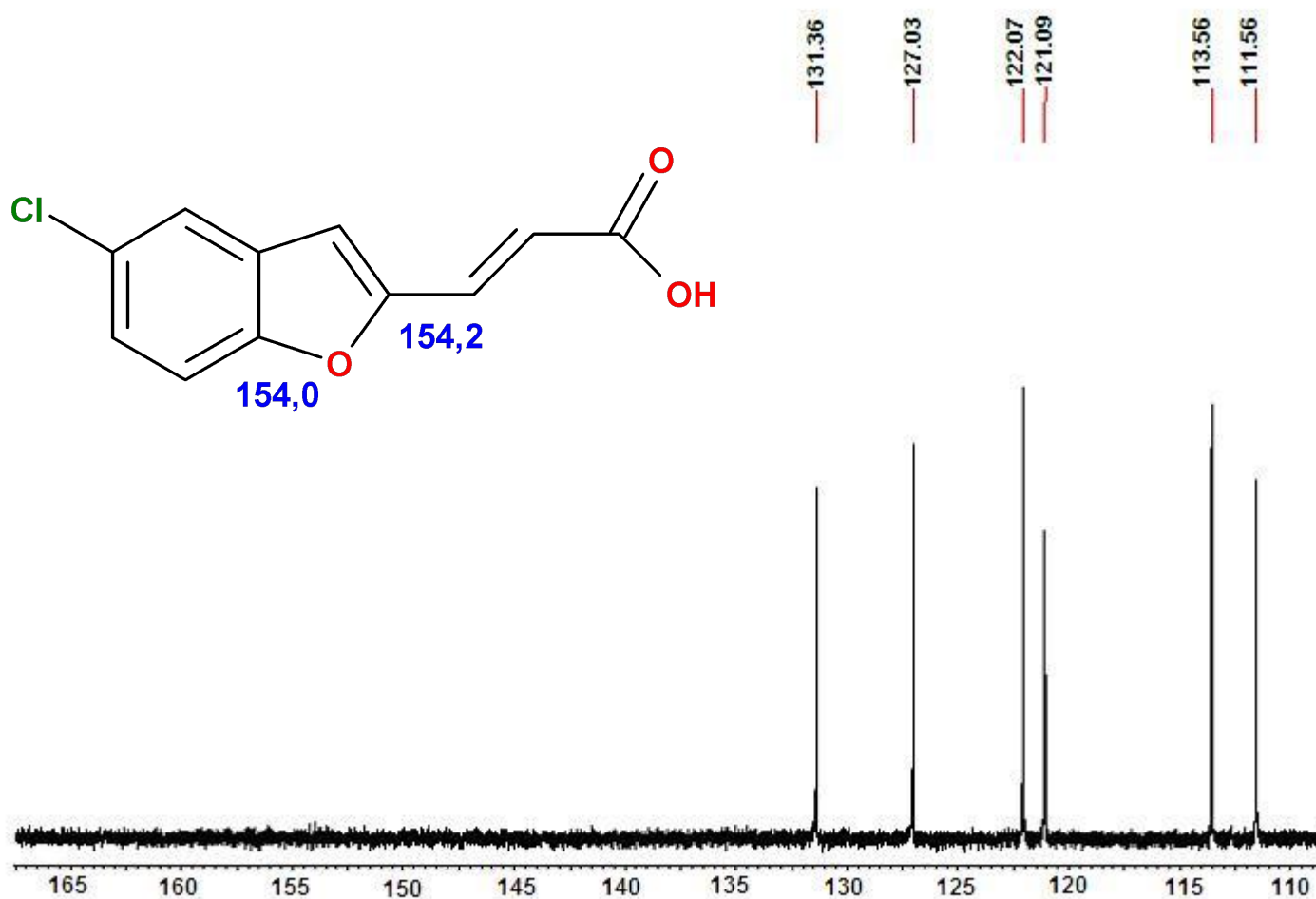
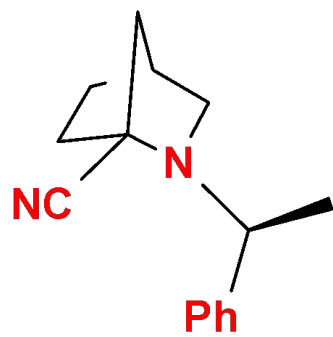
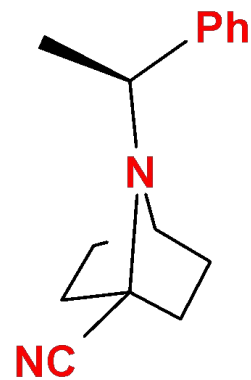


Рис. 3. Спектр DEPT сполуки 1 (розчинник – ДМСО- $D_6$ ). Показано лише фрагмент спектру, що містить сигнали ароматичних атомів вуглецю. |

ПРИКЛАД 2  
( $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ -ЯМР, DEPT)

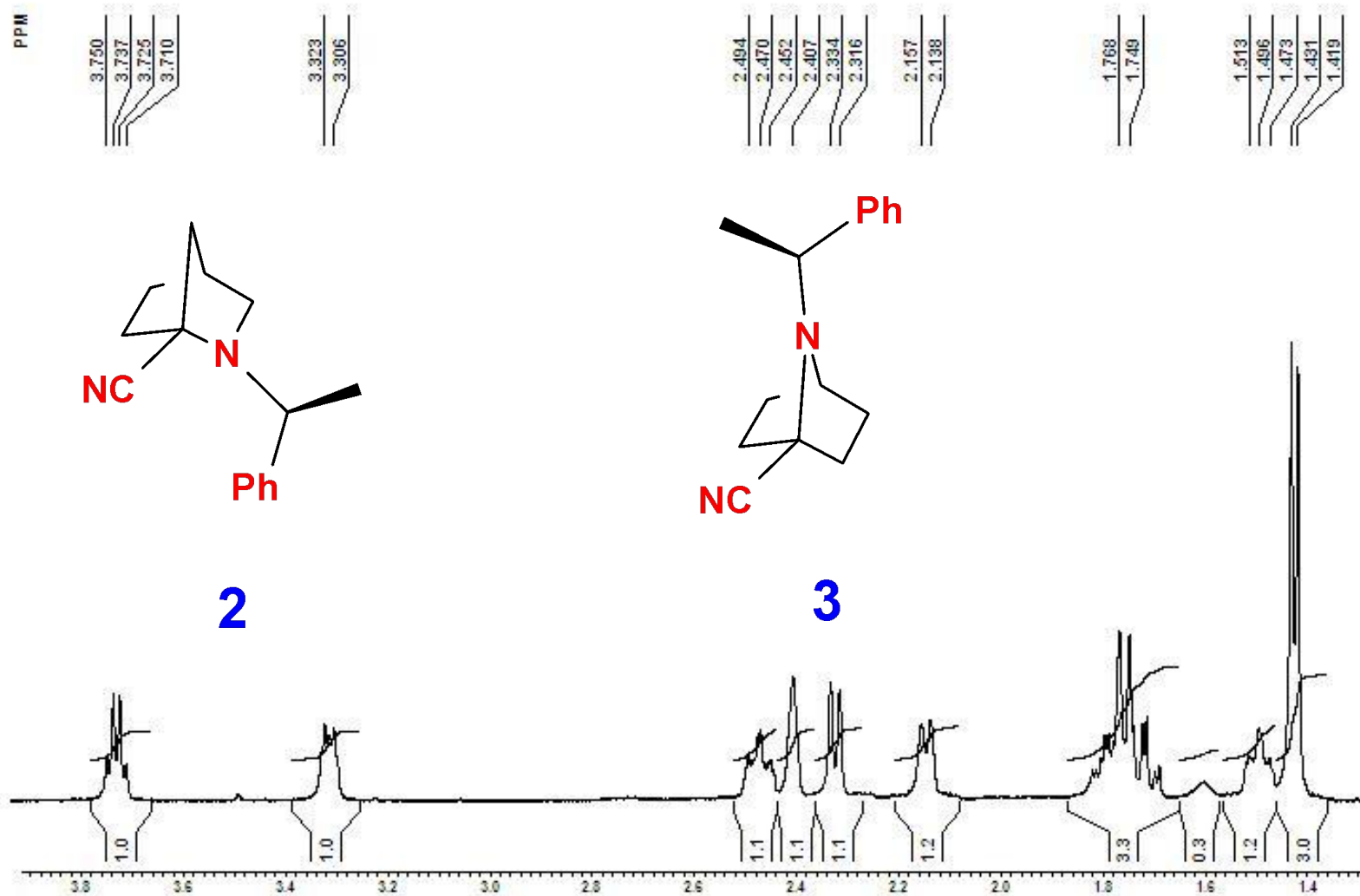


2

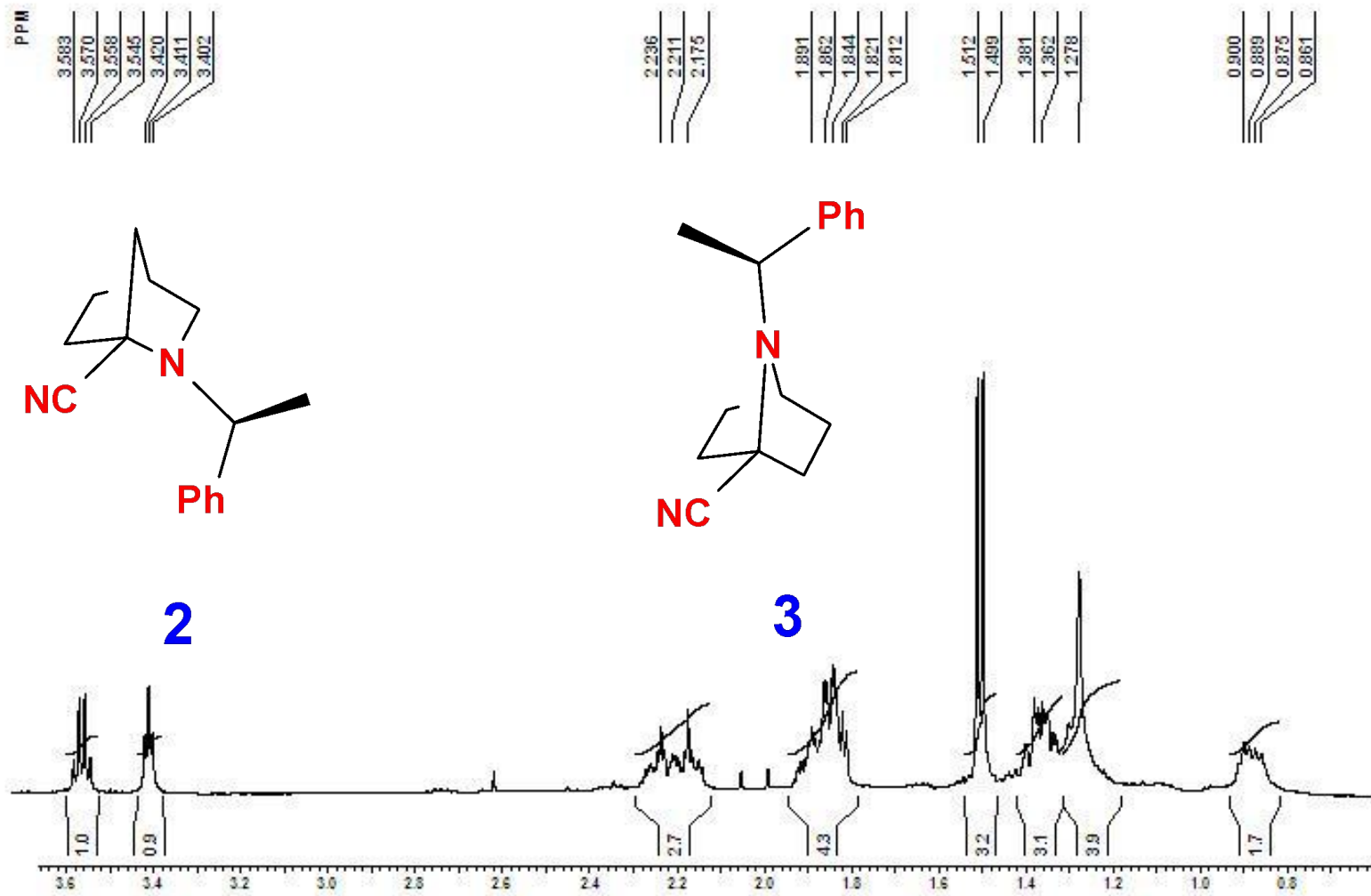


3

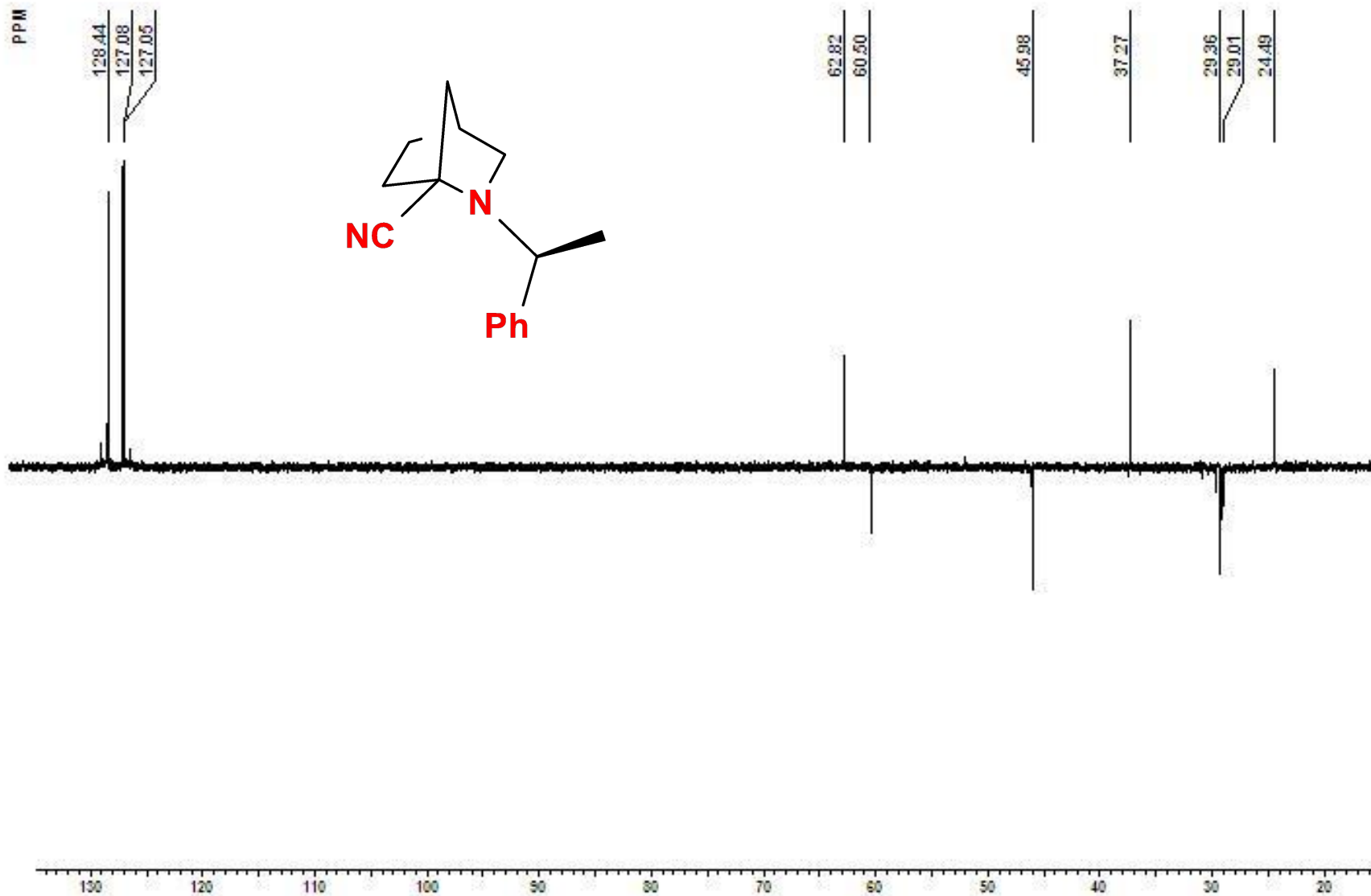
## ПРИКЛАД 2 (<sup>1</sup>H-ЯМР сполуки 2)



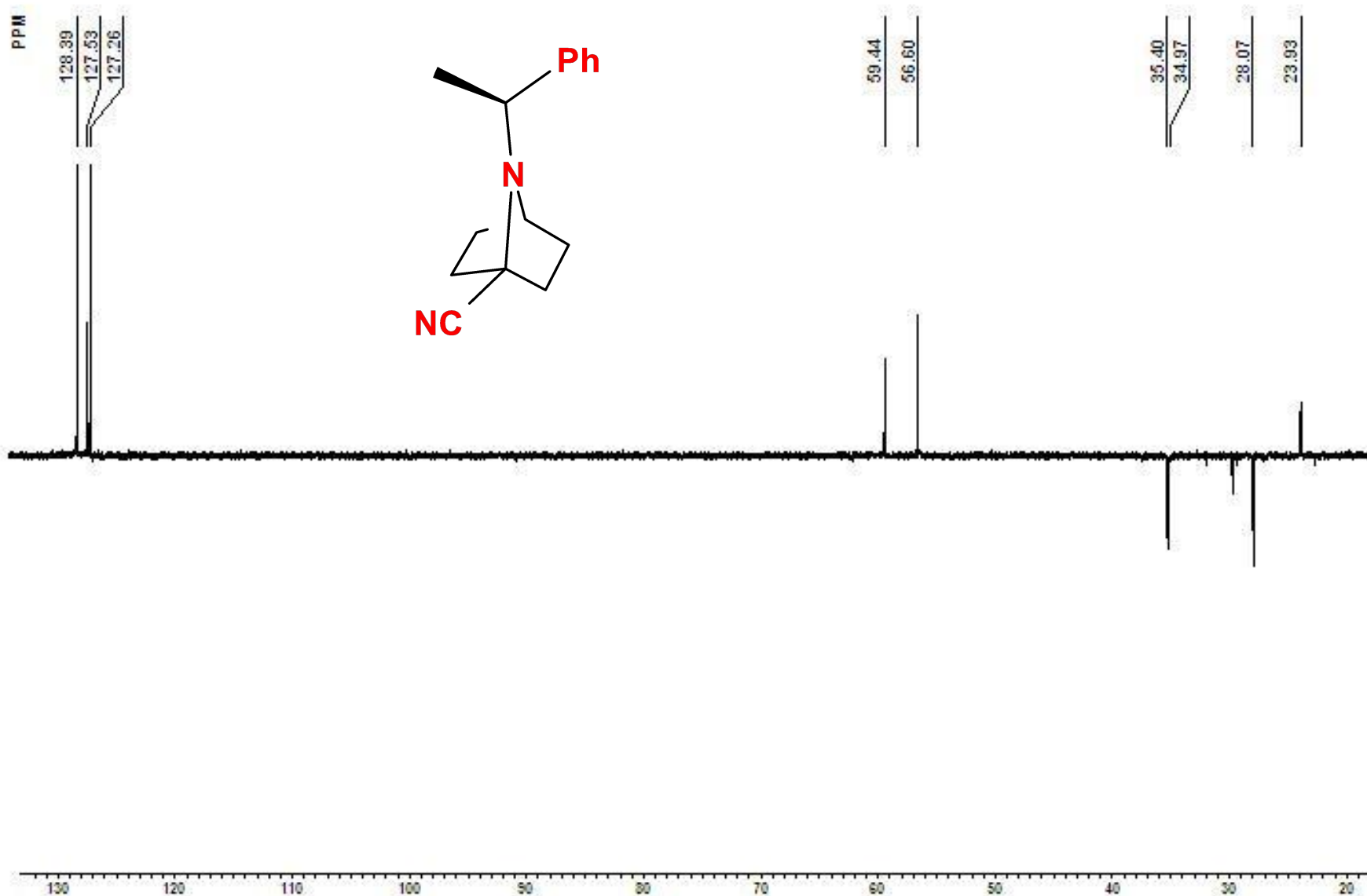
## ПРИКЛАД 2 (<sup>1</sup>H-ЯМР сполуки 3)



## ПРИКЛАД 2 (DEPT сполуки 2)

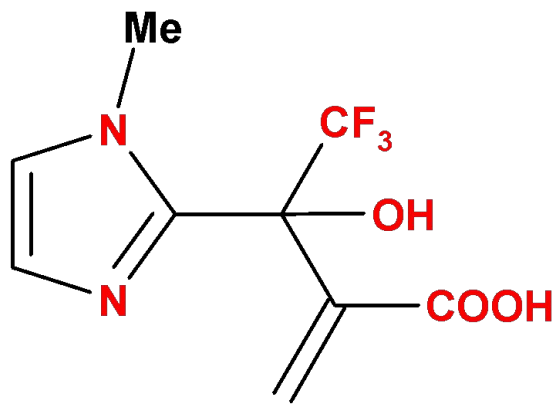


## ПРИКЛАД 2 (DEPT сполуки 3)



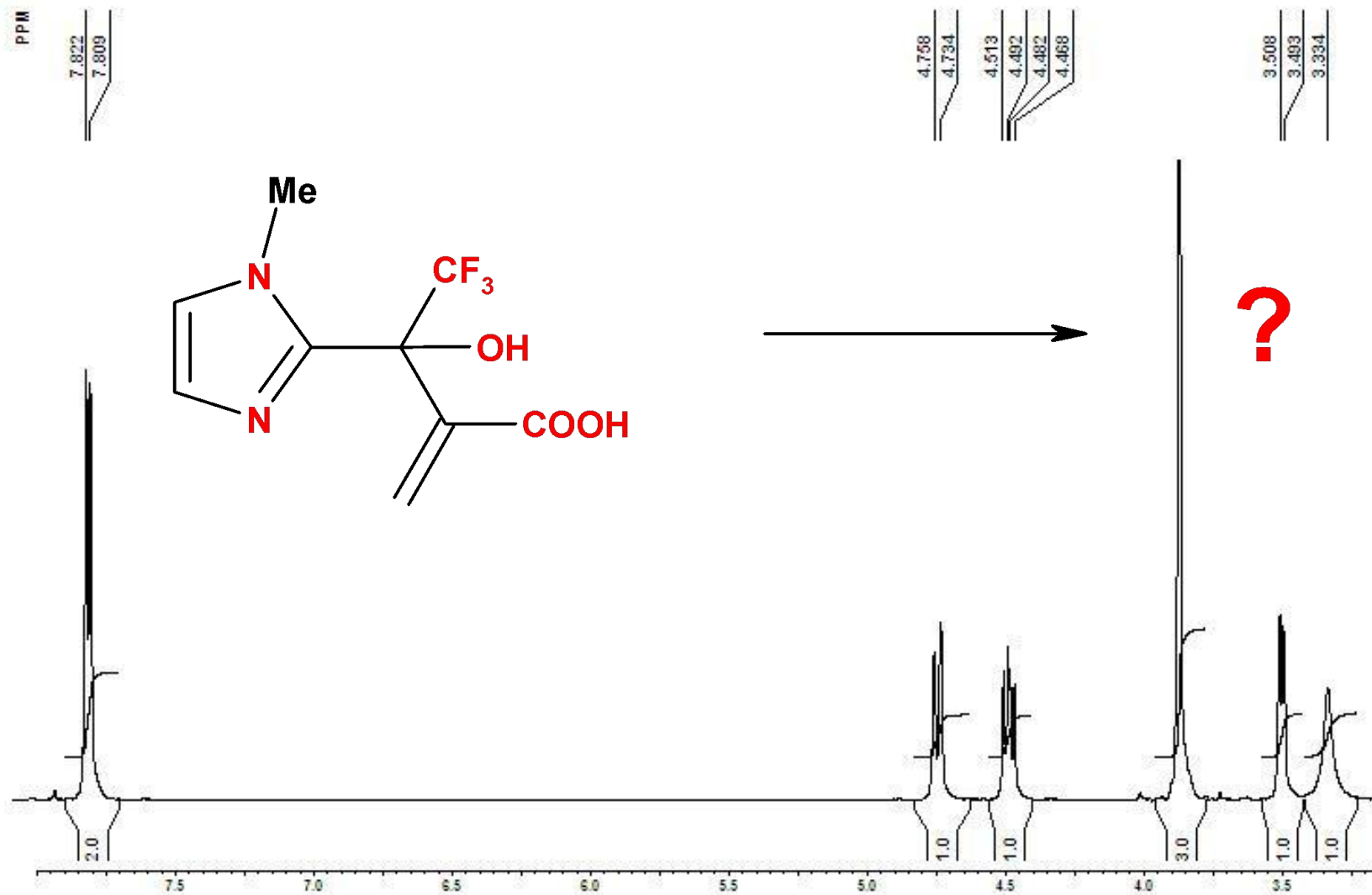


ПРИКЛАД 3  
( $^1\text{H}$ -,  $^{13}\text{C}$ -ЯМР, DEPT, HSQC, HMBC, NOESY)



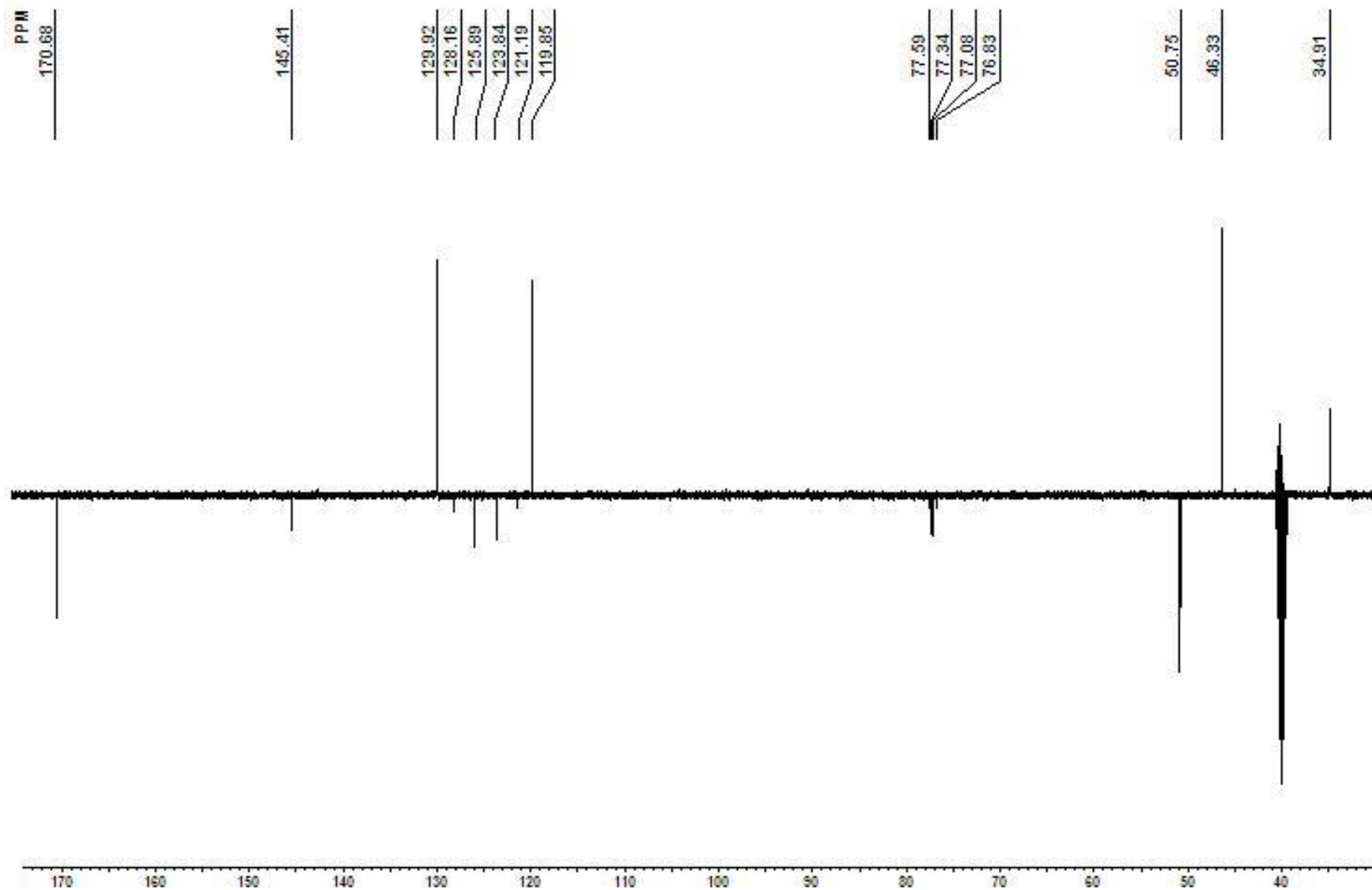
?

### ПРИКЛАД 3 (<sup>1</sup>H-ЯМР спектр невідомої сполуки)

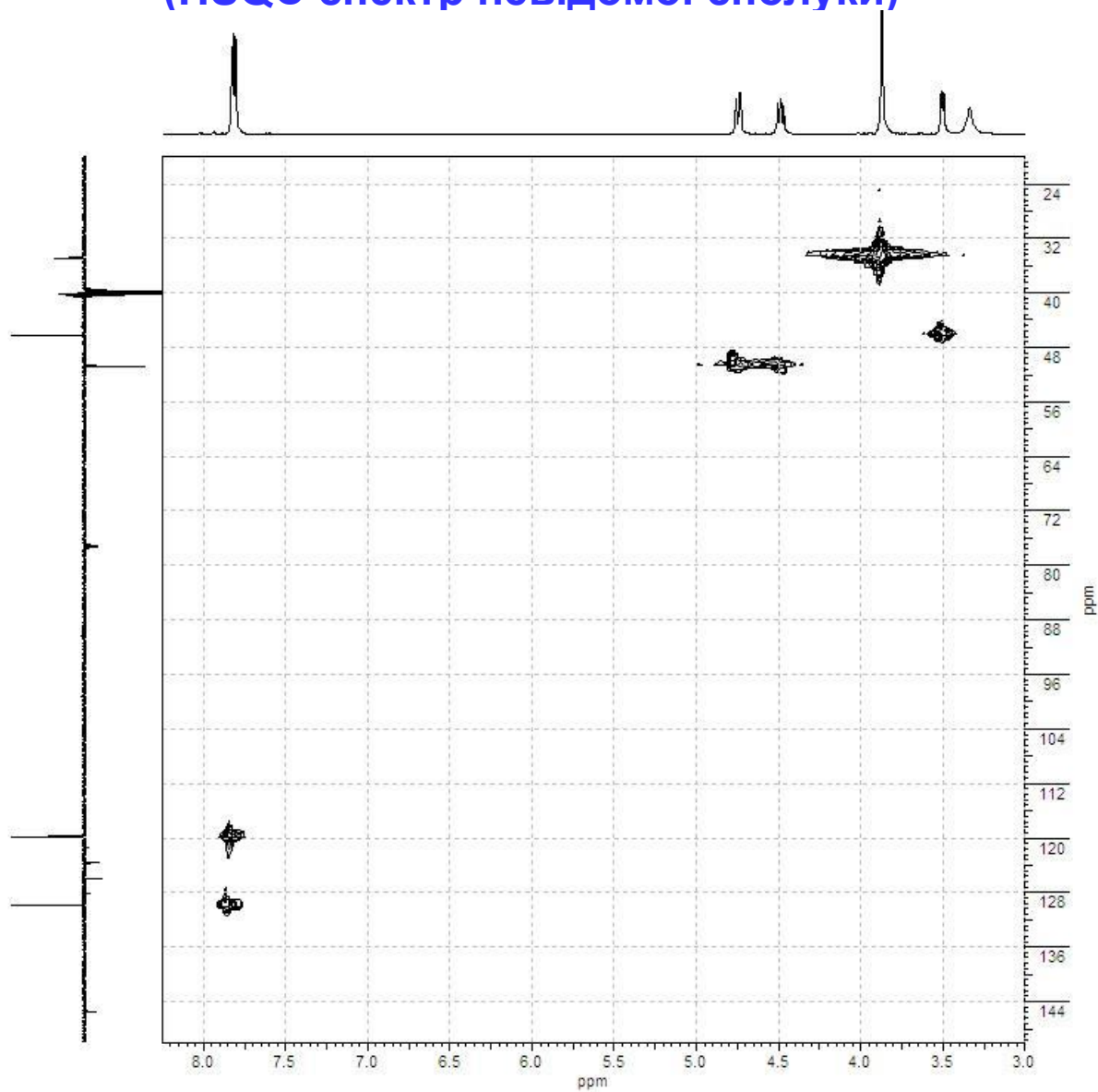


# ПРИКЛАД 3

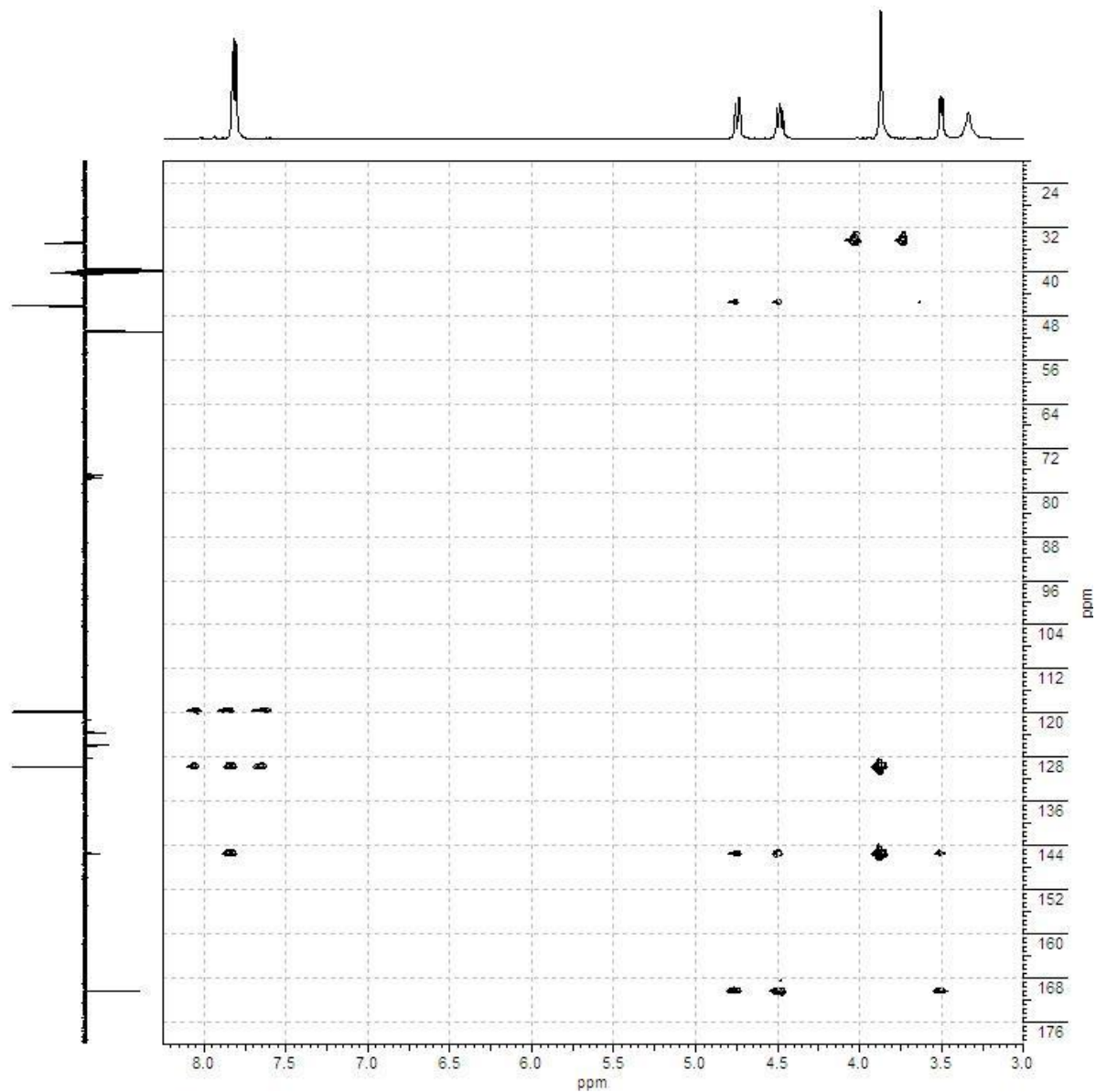
( $^{13}\text{C}$ -ЯМР ІНЕРТ спектр невідомої сполуки)



# ПРИКЛАД 3 (HSQC спектр невідомої сполуки)



# ПРИКЛАД 3 (НМВС спектр невідомої сполуки)



# ПРИКЛАД 3 (NOESY спектр невідомої сполуки)

