



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
-



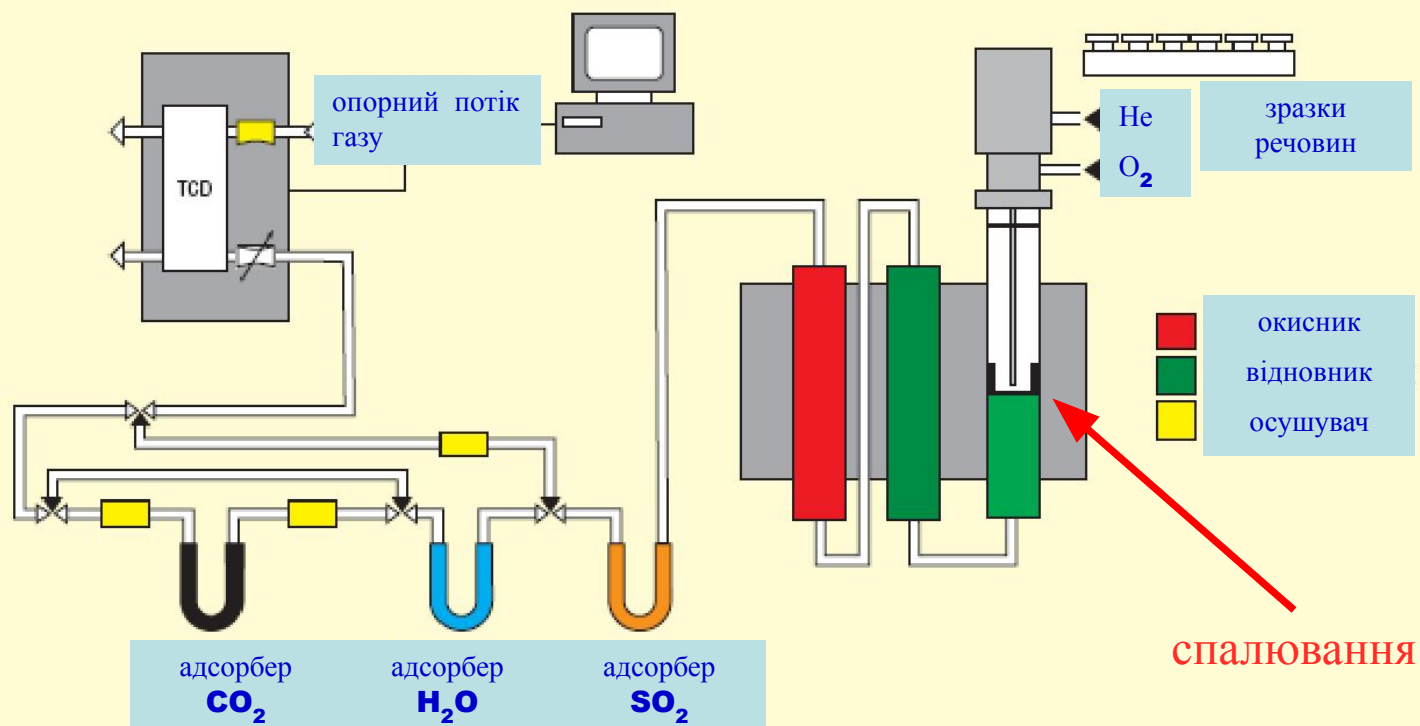
фізичні і хімічні методи дослідження

- 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**

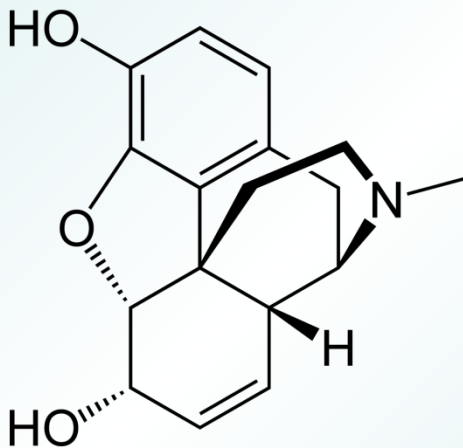




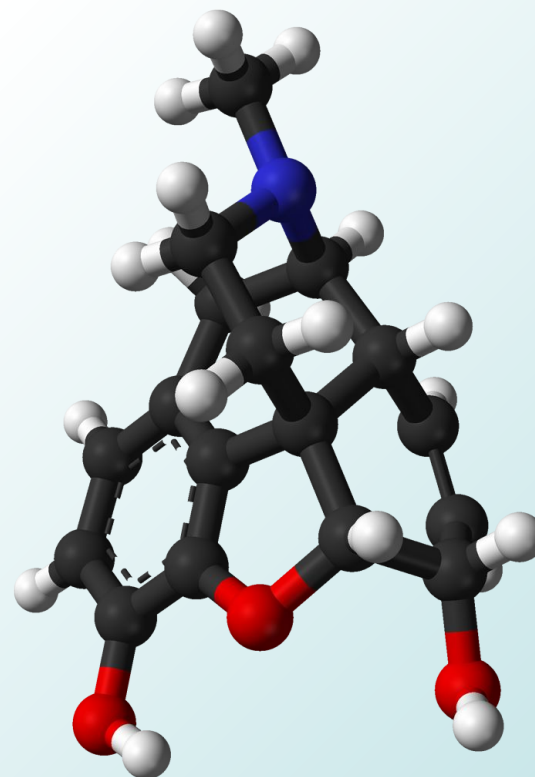
ІНШИЙ ПРИКЛАД – ВСТАНОВЛЕННЯ БУДОВИ МОРФІНУ ХІМІЧНИМИ МЕТОДАМИ

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.



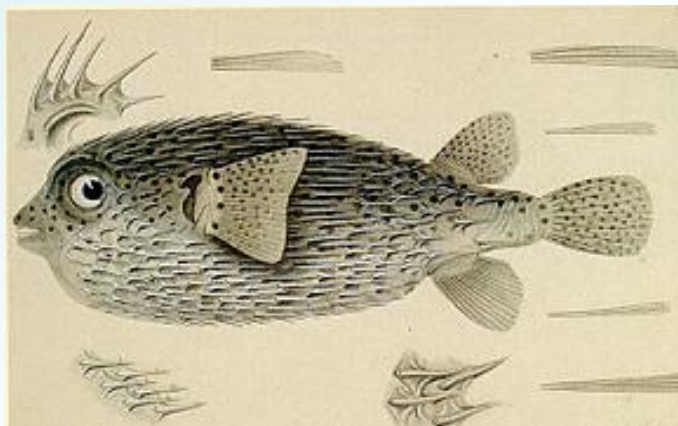
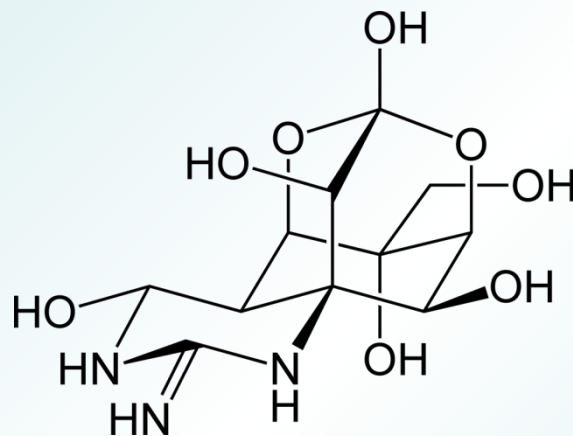
Просторову будову було
встановлено значно пізніше...





БУДОВА ТЕТРОДОТОКСИНУ

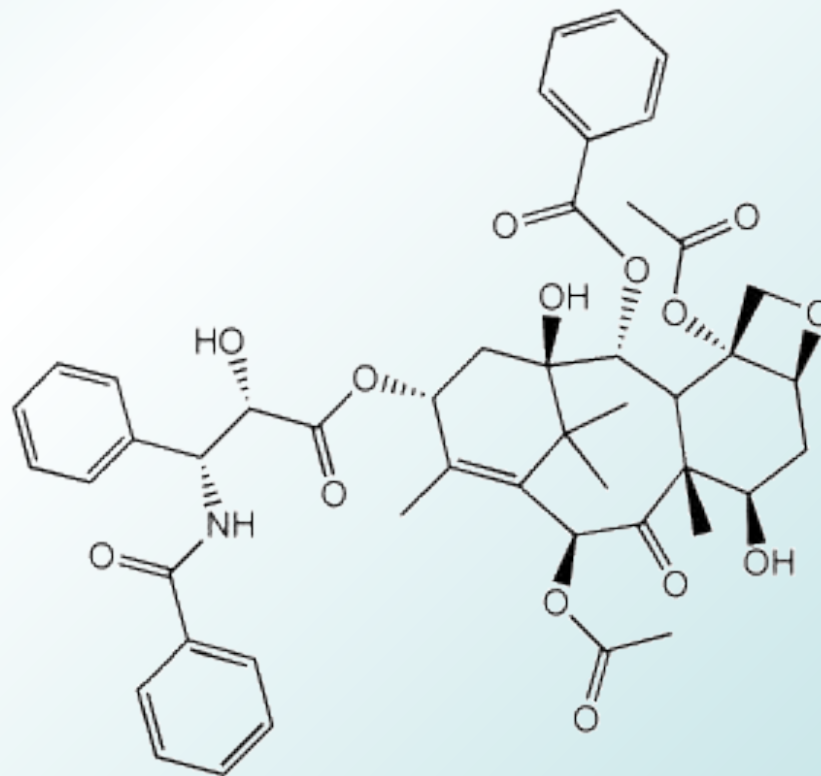
Була встановлена з використанням хімічних та фізичних методів дослідження за декілька років (1960-ті)





БУДОВА ТАКСОЛУ

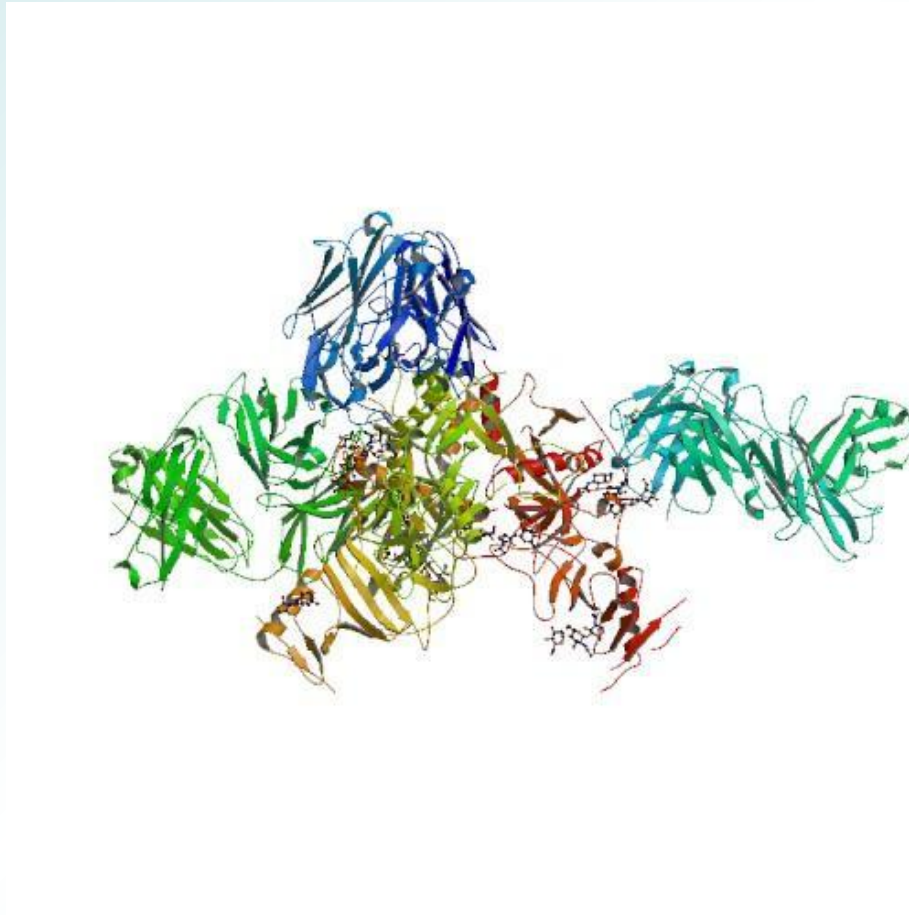
встановлена методами мас-спектрометрії, ЯМР та ІЧ-спектроскопії на початку 1970-х років





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

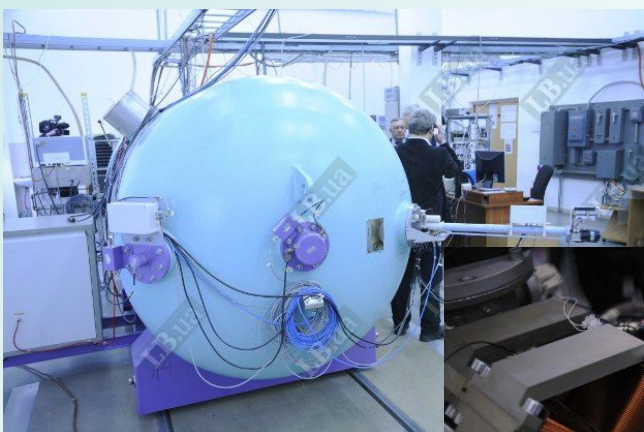
**-БАЗУЮТЬСЯ НА ІНШИХ
ФІЗИЧНИХ ЯВИЩАХ**

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

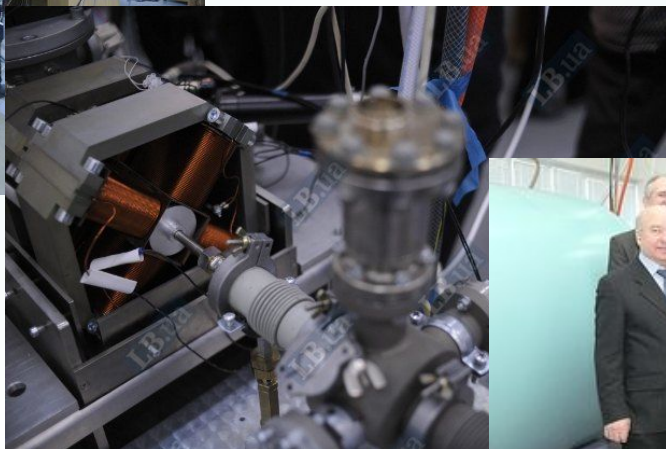
і багато ін.



неспектроскопичні методи дослідження

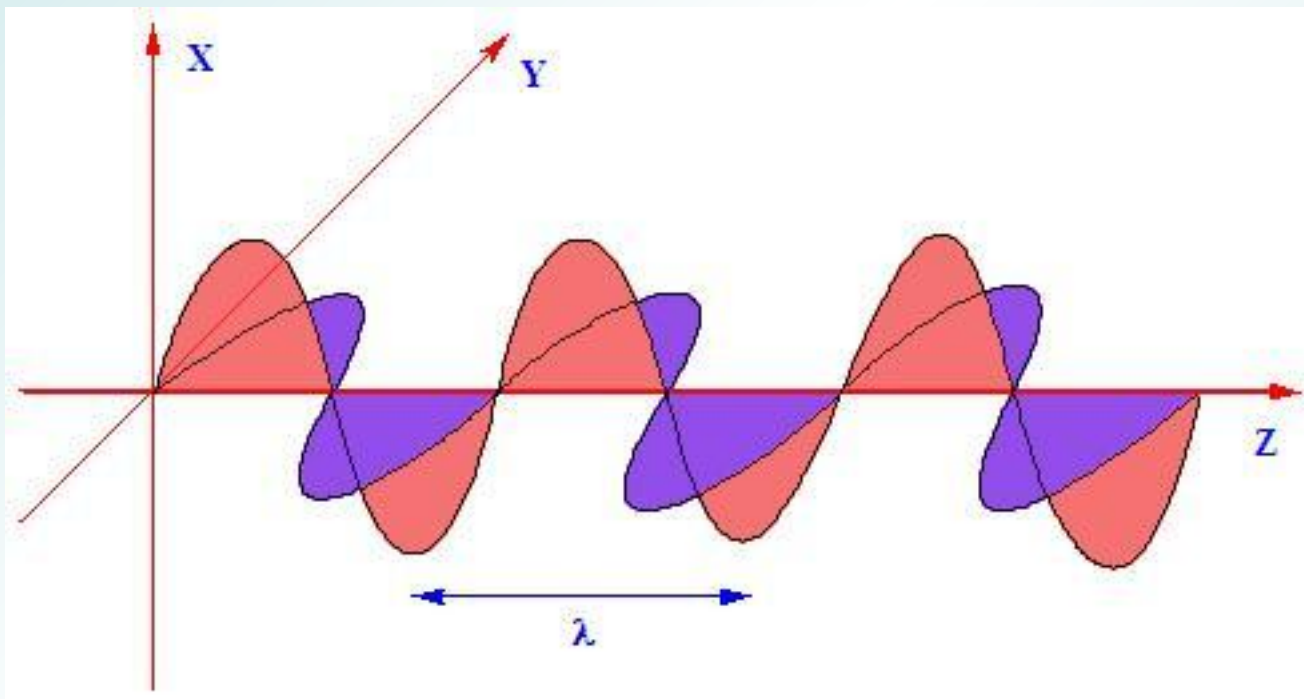


СКАНУЮЧИЙ ЯДЕРНИЙ ЗОНД ІВТ





електромагнітні хвилі



$$v = c / \lambda$$

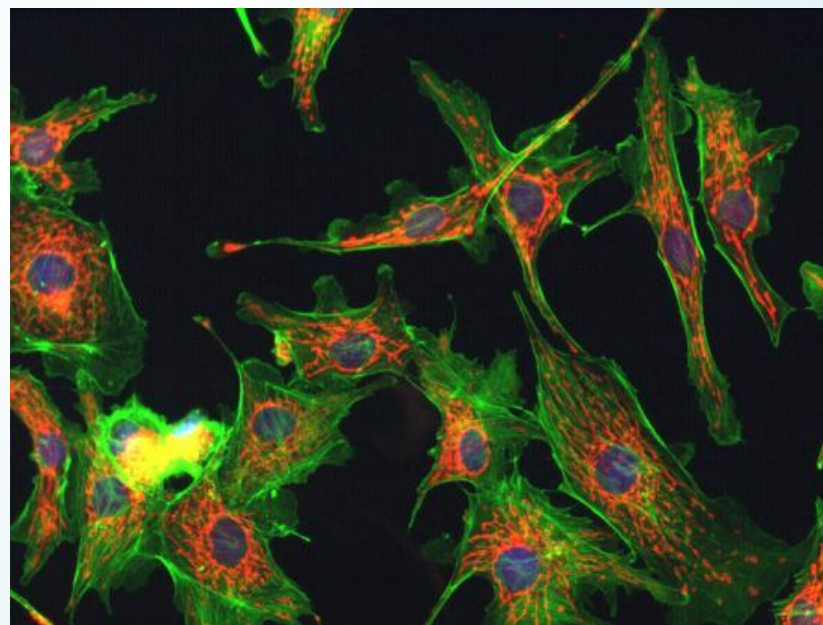


взаємодія електромагнітного випромінювання з речовинами

ОПТИЧНА МІКРОСКОПІЯ



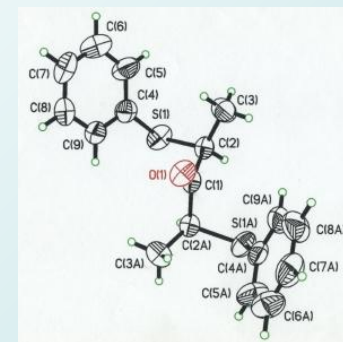
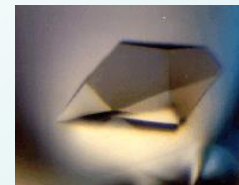
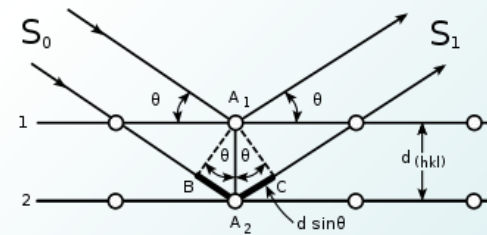
Leica DM IL LED Fluo





взаємодія електромагнітного випромінювання з речовинами

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ





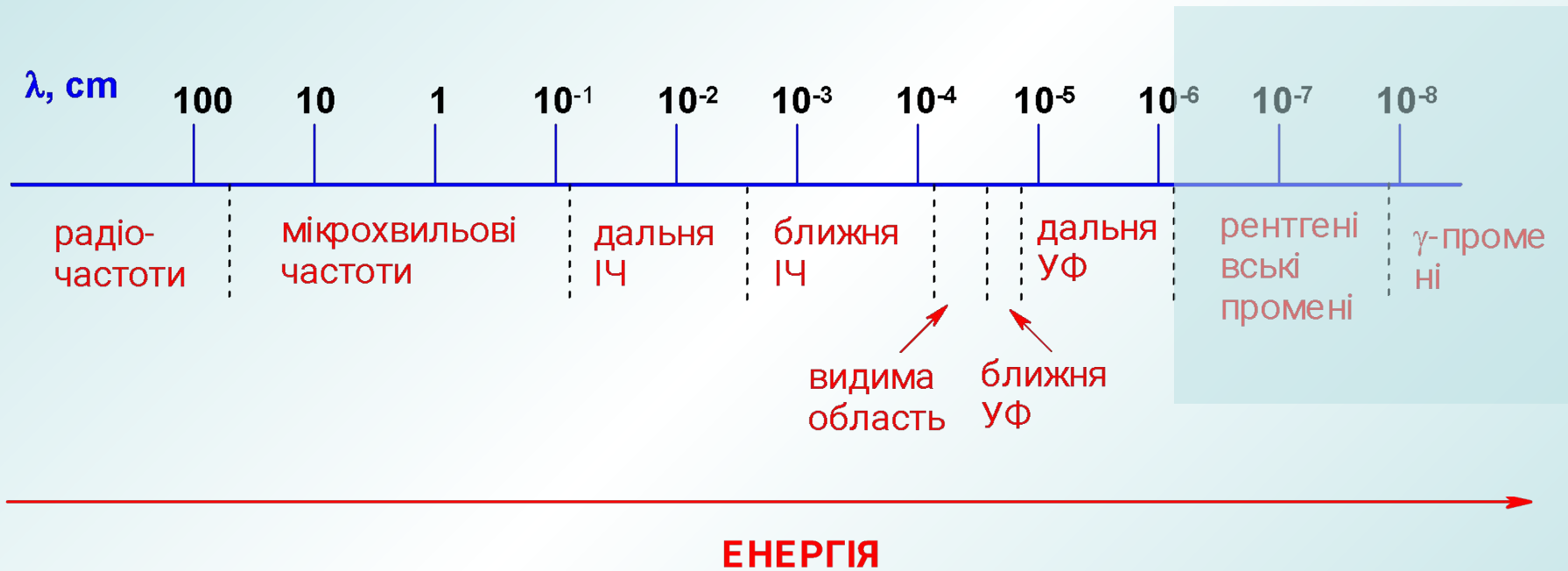
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

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

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



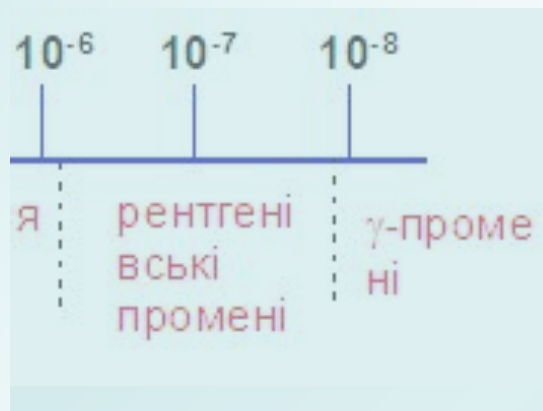
ШКАЛА ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ВИПРОМІНЮВАНЬ





СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

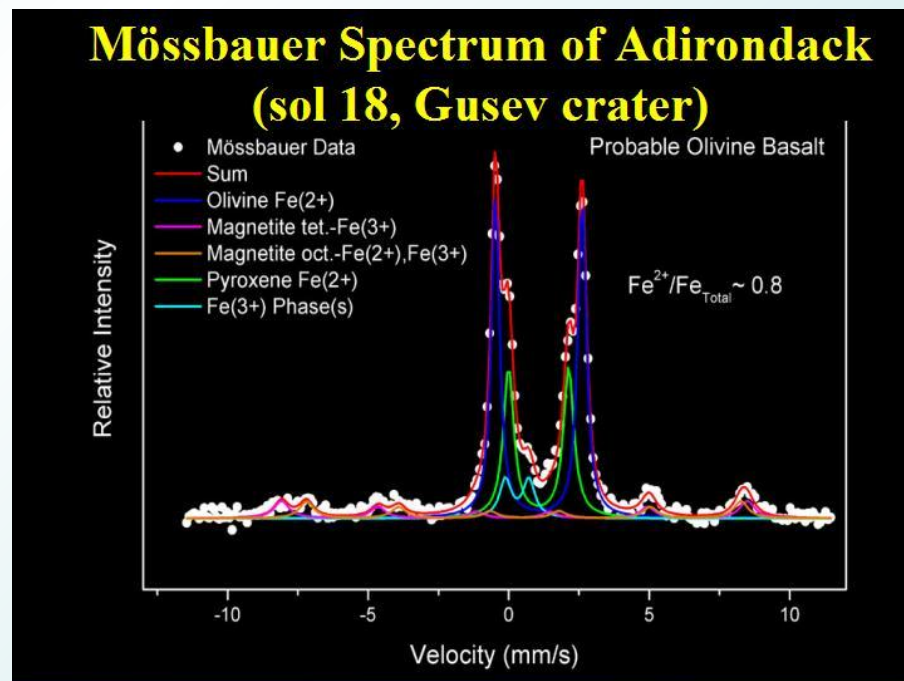
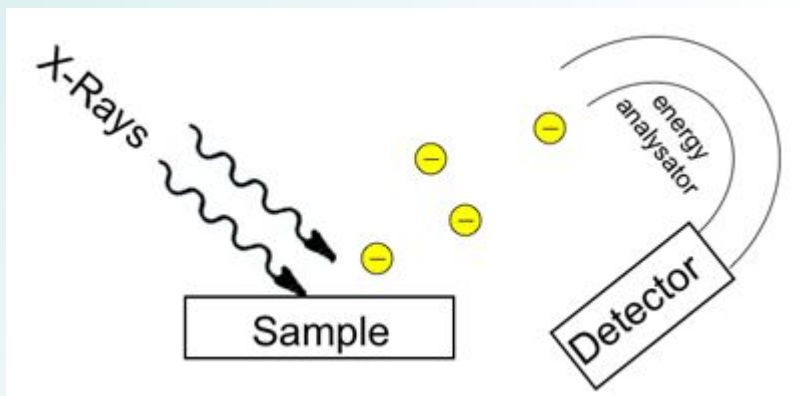
ЕЛЕКТРОНИ
ВНУТРІШНІХ
ЗОВНІШНІХ
ЕЛЕКТРОННИХ
ОБОЛОНОК



НУКЛОНІ В
ЯДРАХ

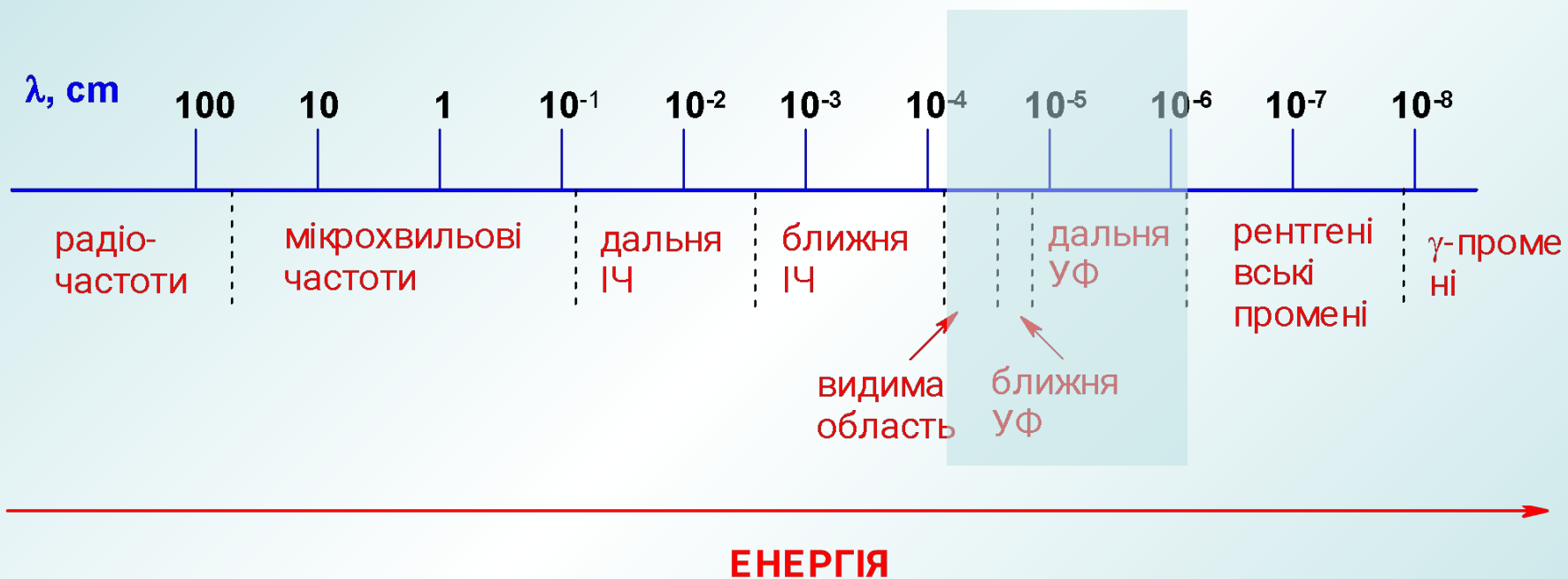
γ-РЕЗОНАНСНА
(МЕСБАУРІВСЬКА)
СПЕКТРОСКОПІЯ

ФОТОЕЛЕКТРОННА СПЕКТРОСКОПІЯ





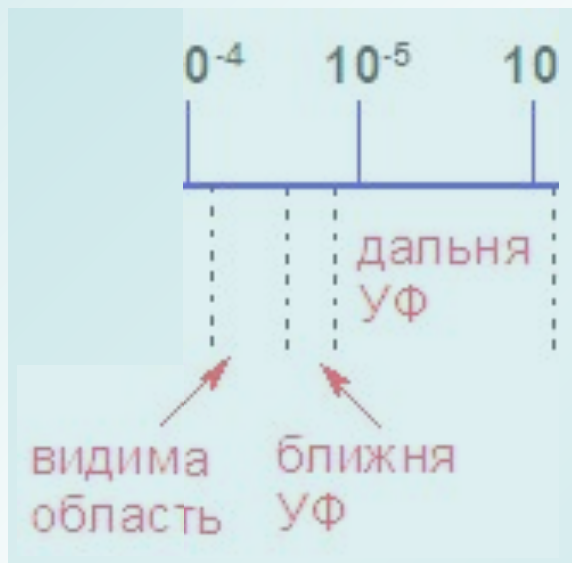
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ



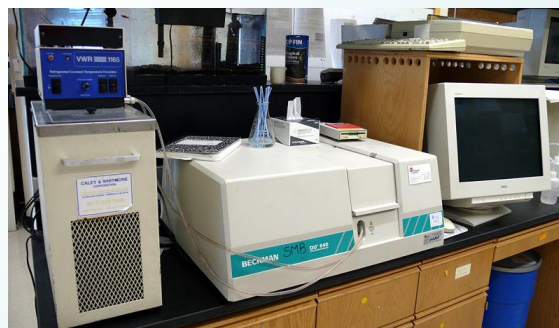


СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

ЕЛЕКТРОНИ
ЗОВНІШНІХ
ЕЛЕКТРОННИХ
ОБОЛОНОК

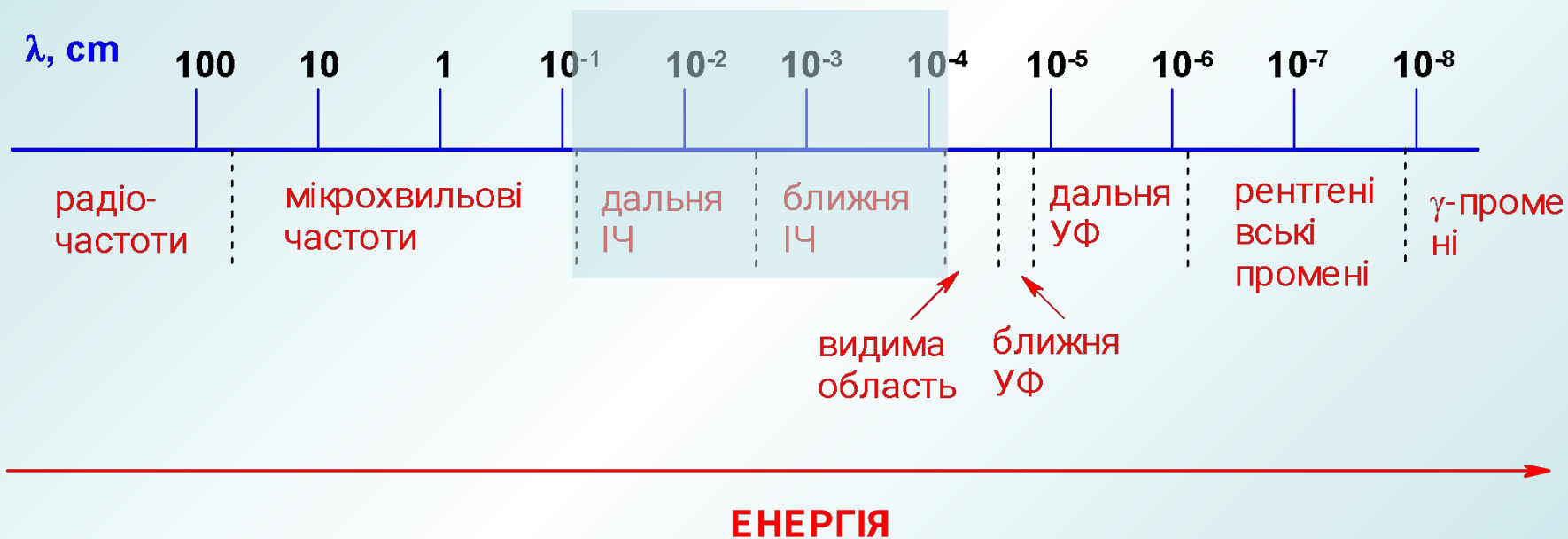


ЕЛЕКТРОННА
СПЕКТРОСКОПІЯ
(ВИДИМА І УФ)





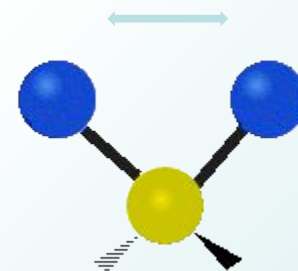
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ



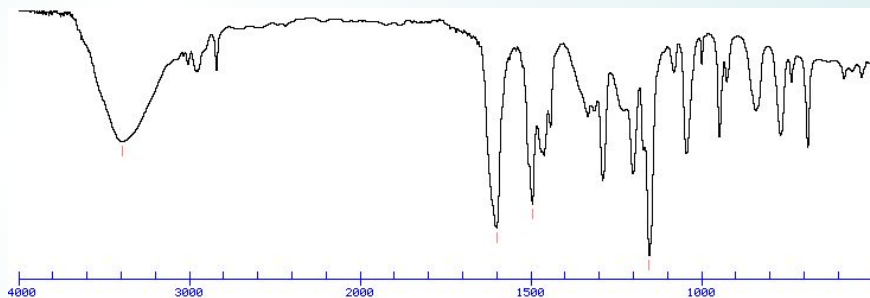


СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

КОЛИВАЛЬНІ
РІВНІ ЕНЕРГІЇ
МОЛЕКУЛ



ІНФРАЧЕРВОНА СПЕКТРОСКОПІЯ





ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

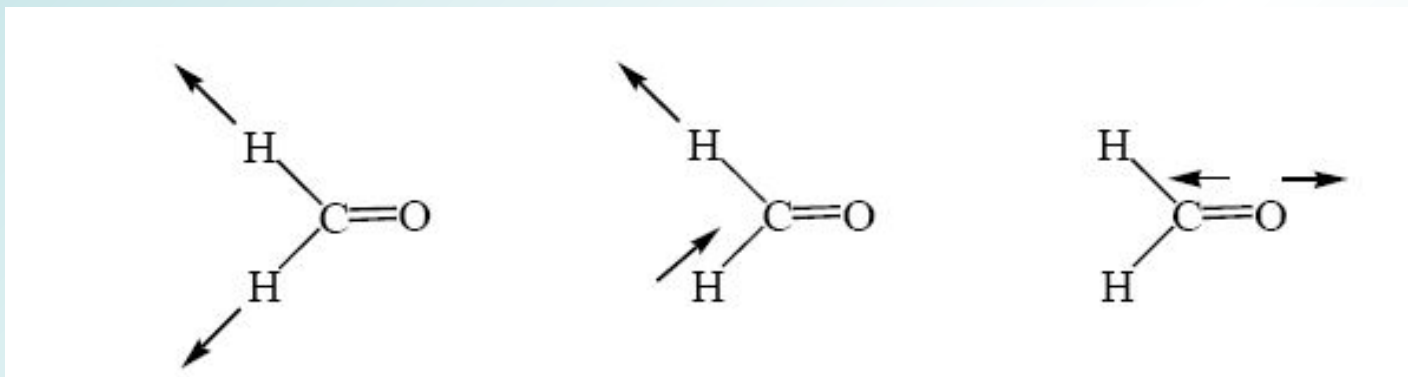
- ІЧ СПЕКТРОСКОПІЯ – ФІЗИЧНИЙ МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ, ЩО БАЗУЄТЬСЯ НА ВЗАЄМОДІЇ МОЛЕКУЛ РЕЧОВИН, ЩО ДОСЛІДЖУЮТЬСЯ З ІНФРАЧЕРВОНИМ (ТЕПЛОВИМ) ВИПРОМІНЮВАННЯМ.

- ІНФРАЧЕРВОНІ ПРОМЕНІ ВИКЛИКАЮТЬ ПЕРЕХОДИ МІЖ ОБЕРТАЛЬНИМИ ТА КОЛИВАЛЬНИМИ РІВНЯМИ МОЛЕКУЛ



ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

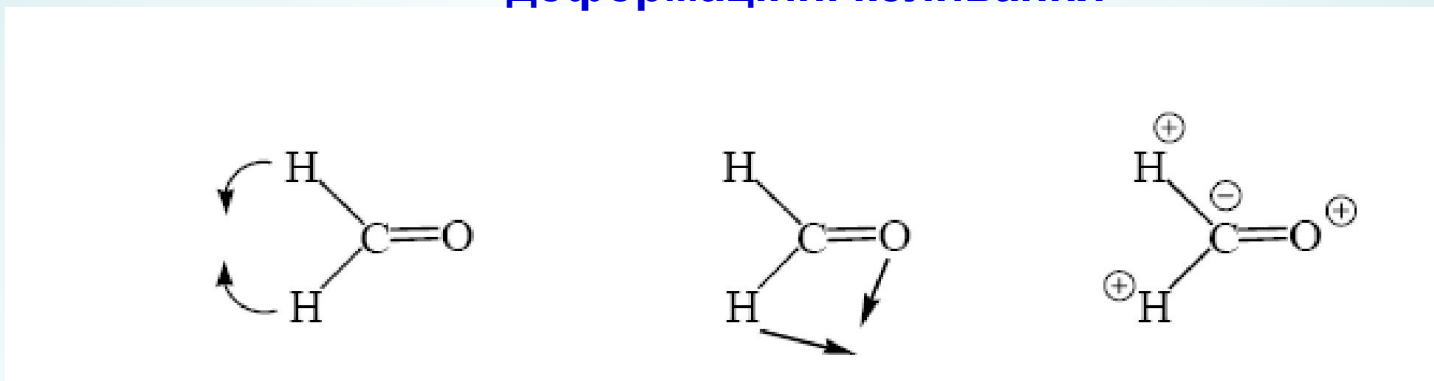
валентні коливання



симетричні

асиметричні

деформаційні коливання

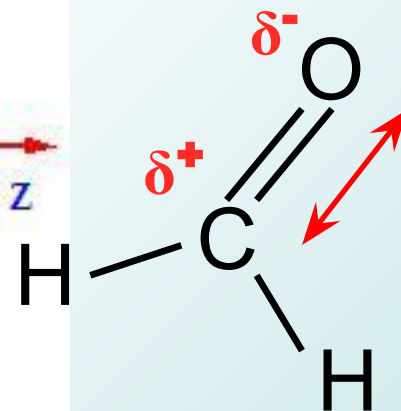
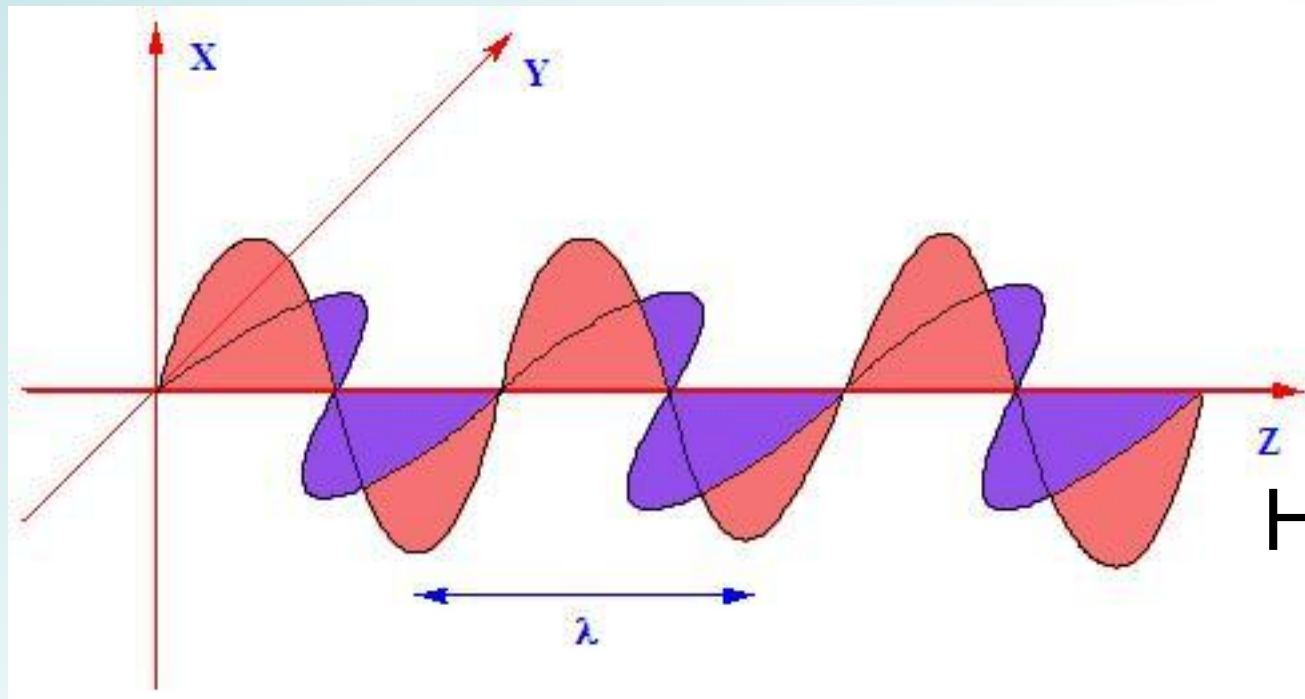


необхідною умовою є зміна дипольного моменту молекул в процесі коливань



ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

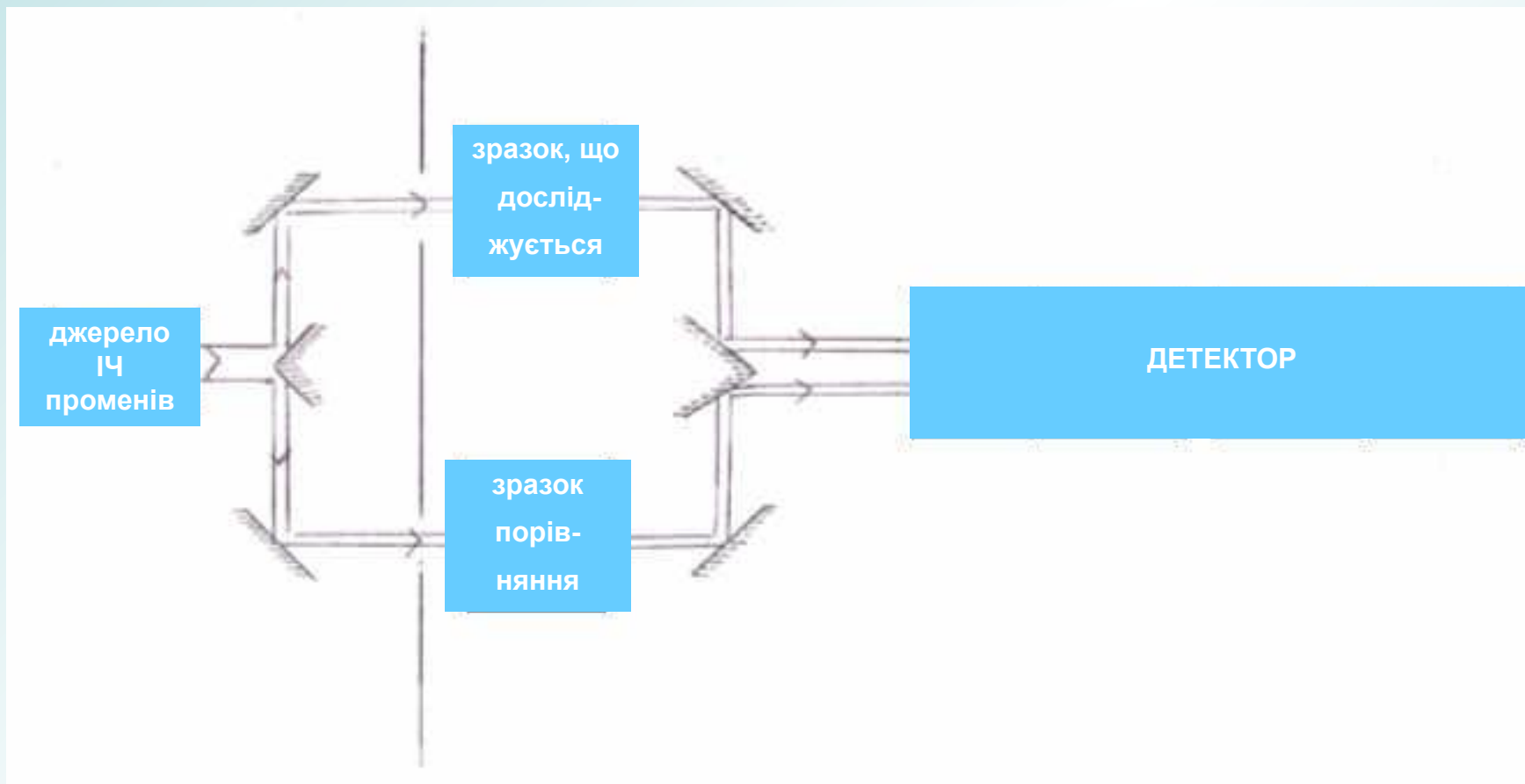
необхідною умовою є зміна дипольного моменту молекул в процесі коливань





ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

принципова схема приладу

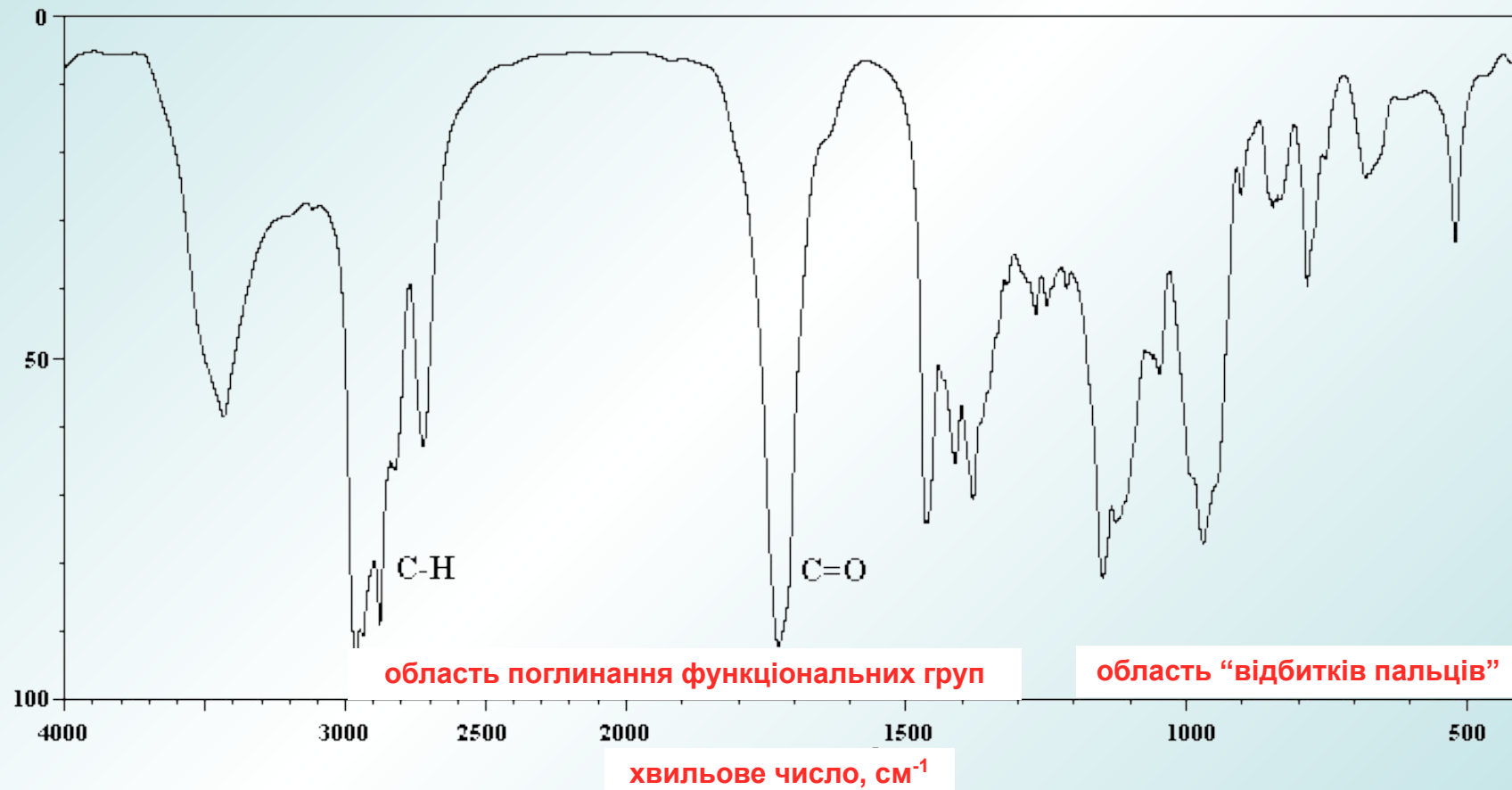




ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

типовий ІЧ-спектр

поглинання, %





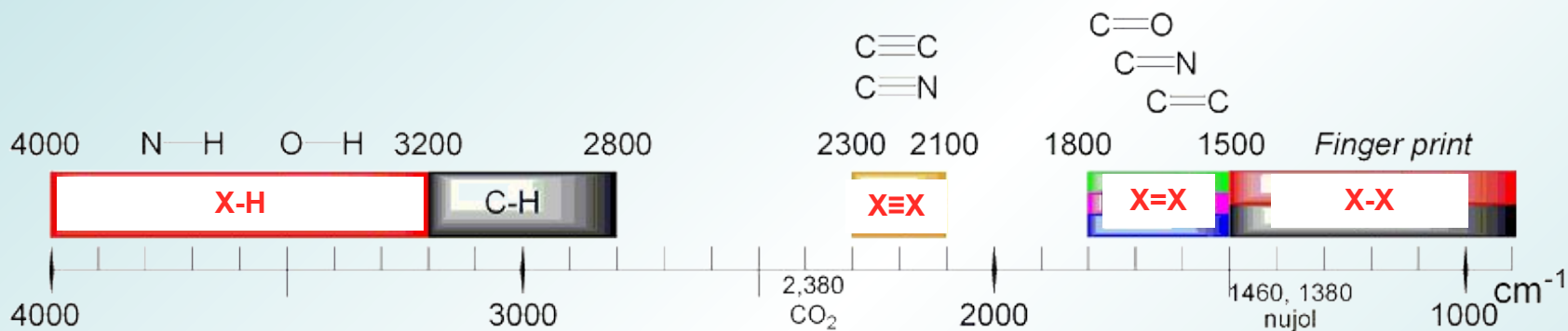
ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

**- ЧАСТОТИ ПОГЛИНАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ГРУП Є
ХАРАКТЕРИСТИЧНИМИ**



ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

поглинання функціональних груп

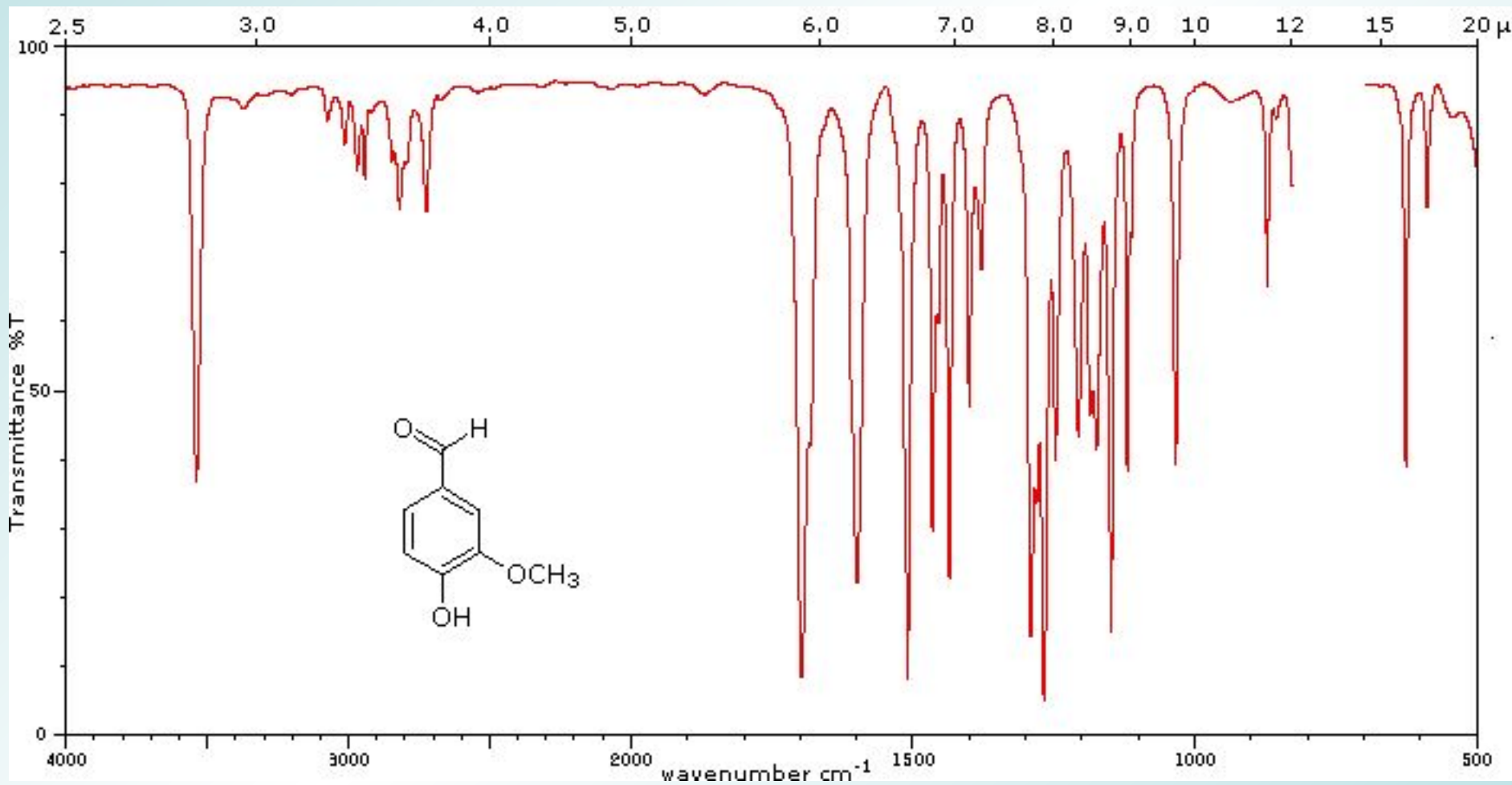


Double Bonds

| Bond | Wavenumber/cm ⁻¹ | 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





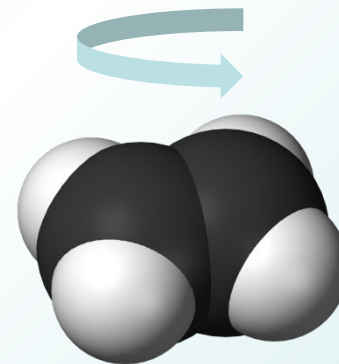
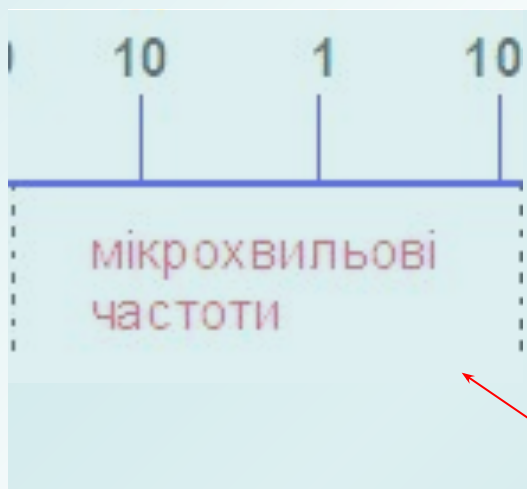
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ





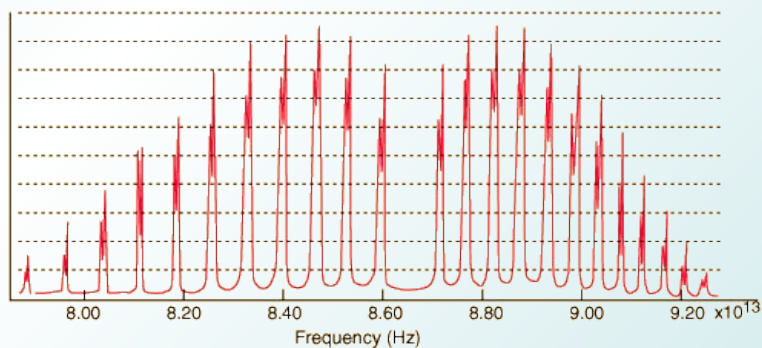
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

ОБЕРТАЛЬНІ
РІВНІ ЕНЕРГІЇ
МОЛЕКУЛ



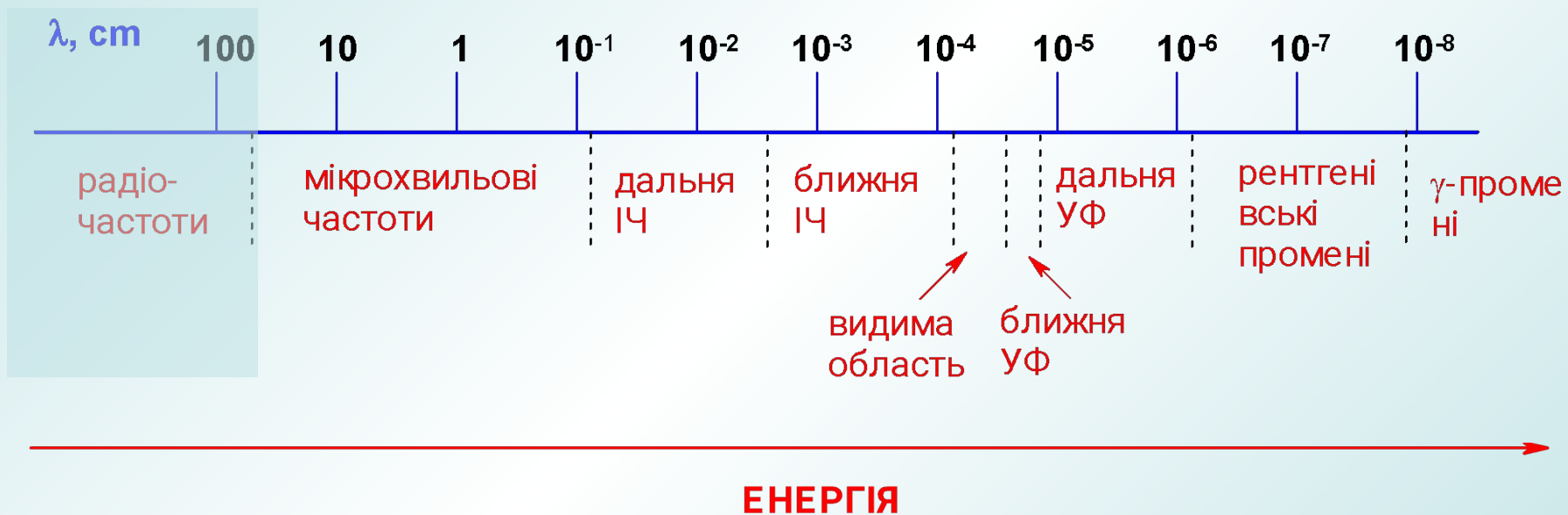
МІКРОХВИЛЬОВА
(ОБЕРТАЛЬНА)
СПЕКТРОСКОПІЯ

ТГц спектроскопія





СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

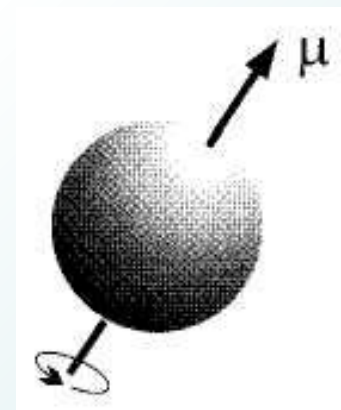
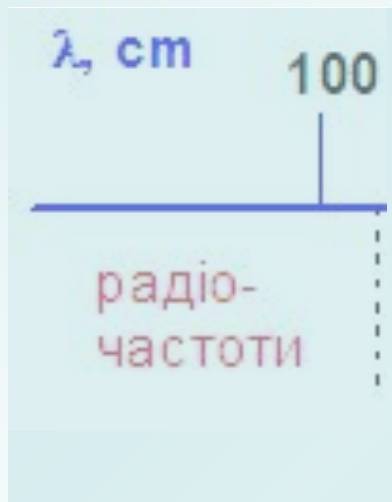




СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

РІВНІ ЕНЕРГІЇ
ЕЛЕКТРОНІВ І
ЯДЕР

МАГНІТНІ
СТАНИ



ЯДЕРНИЙ МАГНІТНИЙ РЕЗОНАНС ТА ЕЛЕКТРОННИЙ
ПАРАМАГНІТНИЙ РЕЗОНАНС





ПРЯМА ТА ОБЕРНЕНА СПЕКТРАЛЬНІ ЗАДАЧІ

ЯМР ^1H , 200 МГц

R #05

