



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
-



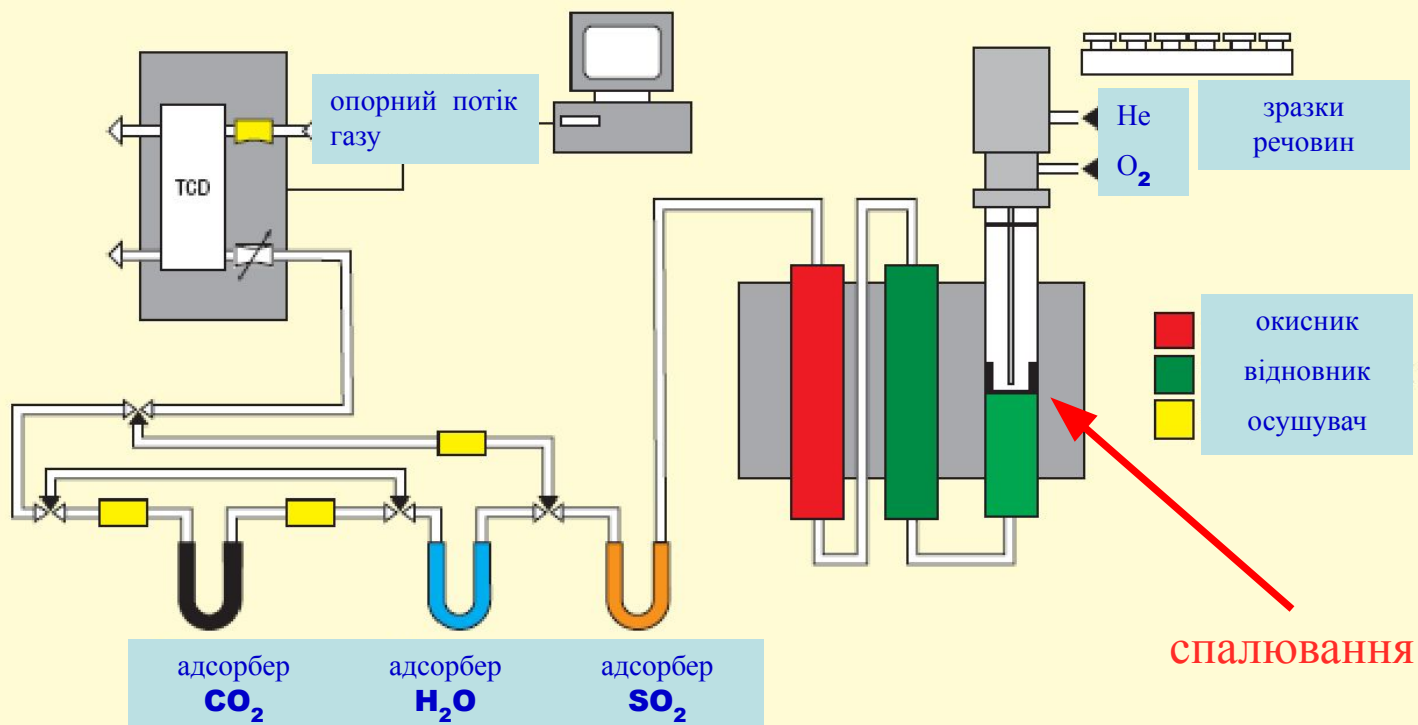
фізичні і хімічні методи дослідження

- 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)
СПОЛУК, ЩО ДОСЛІДЖУЮТЬСЯ**

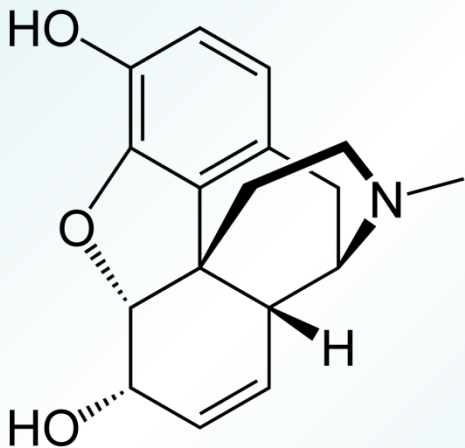




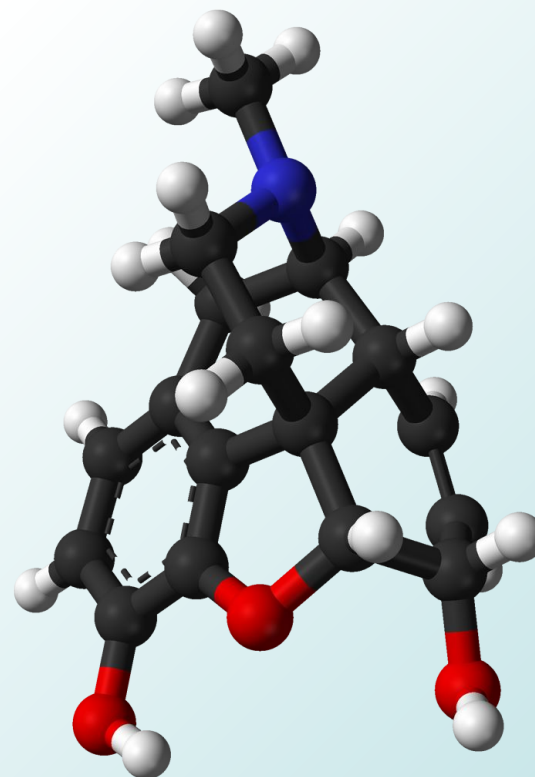
ІНШИЙ ПРИКЛАД – ВСТАНОВЛЕННЯ БУДОВИ МОРФІНУ ХІМІЧНИМИ МЕТОДАМИ

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.



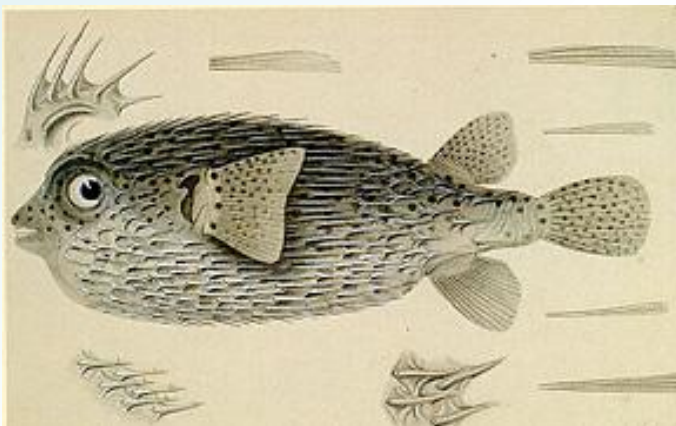
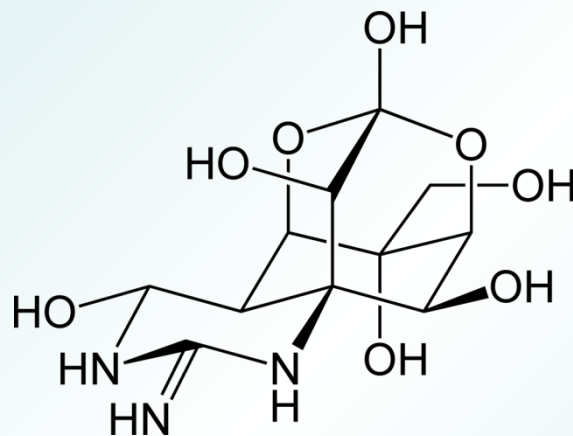
Просторову будову було
встановлено значно пізніше...





БУДОВА ТЕТРОДОТОКСИНУ

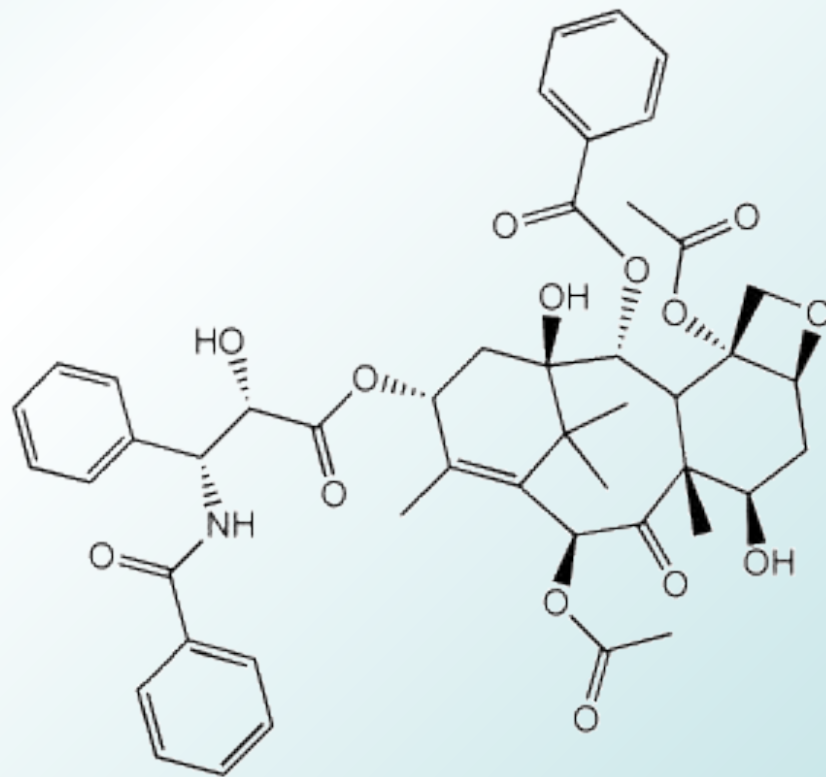
Була встановлена з використанням хімічних та фізичних методів дослідження за декілька років (1960-ті)





БУДОВА ТАКСОЛУ

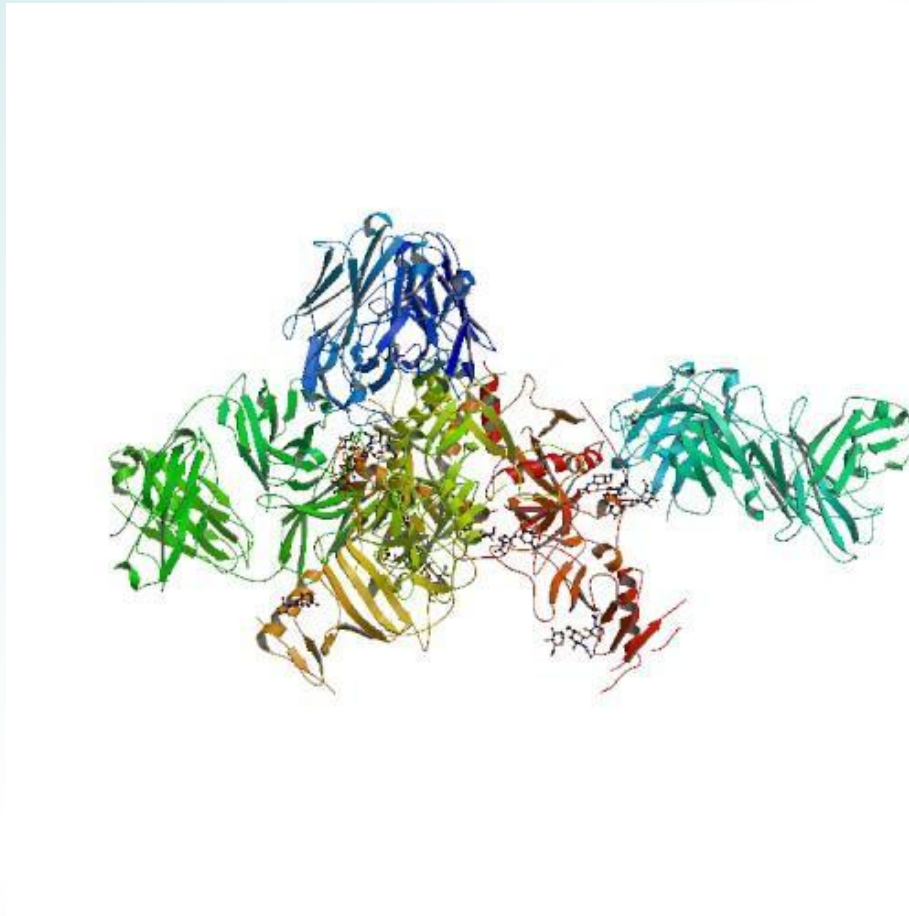
встановлена методами мас-спектрометрії, ЯМР та ІЧ-спектроскопії на початку 1970-х років





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

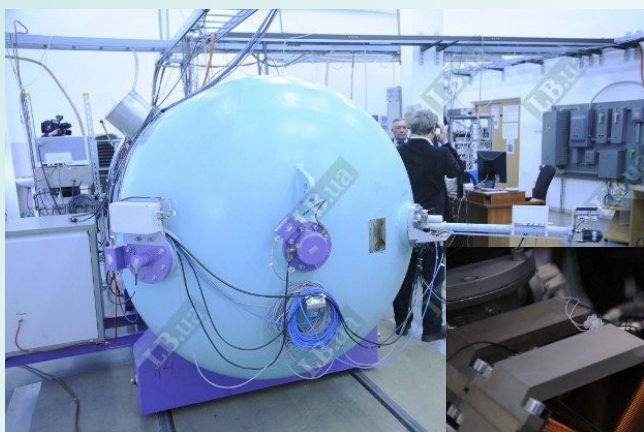
**-БАЗУЮТЬСЯ НА ІНШИХ
ФІЗИЧНИХ ЯВИЩАХ**

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

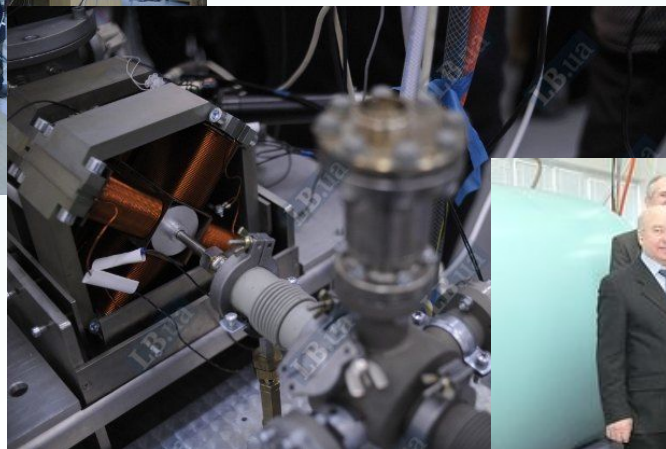
і багато ін.



неспектроскопічні методи дослідження

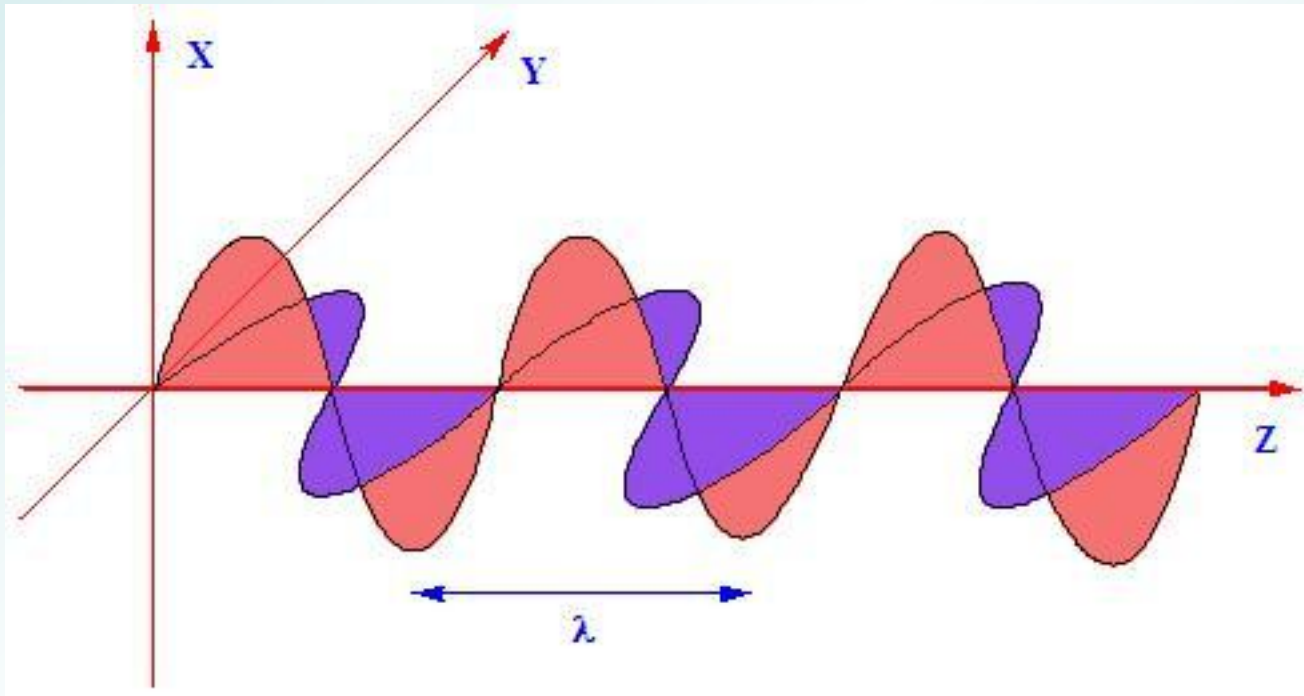


СКАНУЮЧИЙ ЯДЕРНИЙ ЗОНД ІВТ





електромагнітні хвилі



$$v = c / \lambda$$

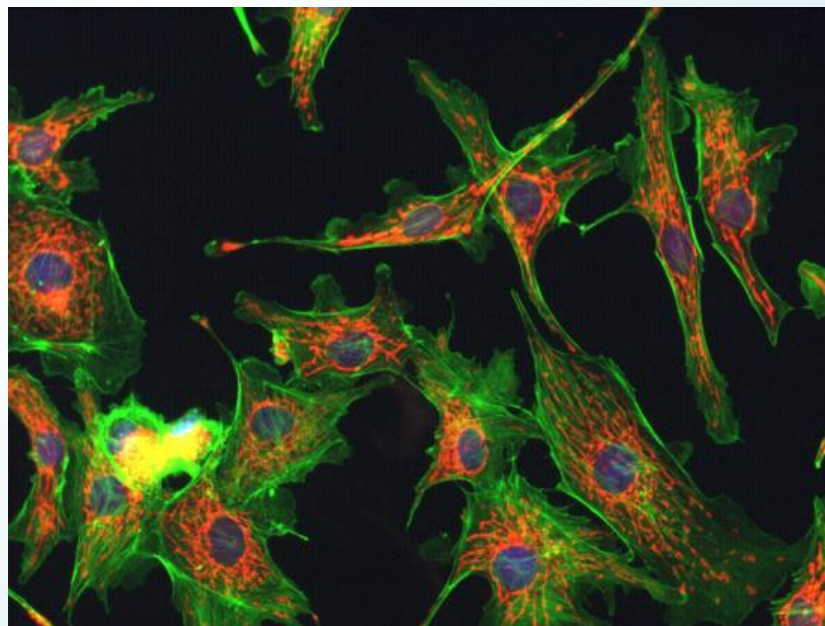


взаємодія електромагнітного випромінювання з речовинами

ОПТИЧНА МІКРОСКОПІЯ



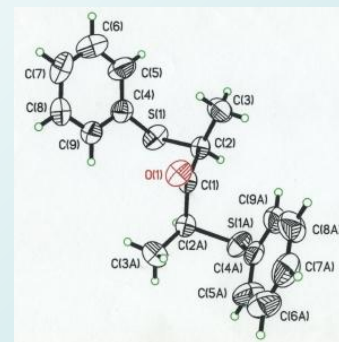
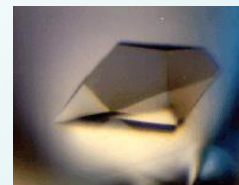
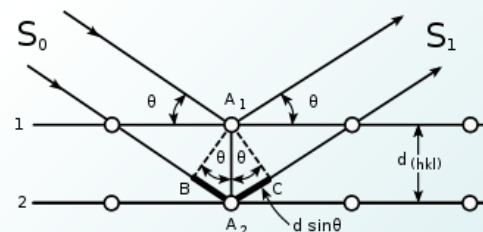
Leica DM IL LED Flu





взаємодія електромагнітного випромінювання з речовинами

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ





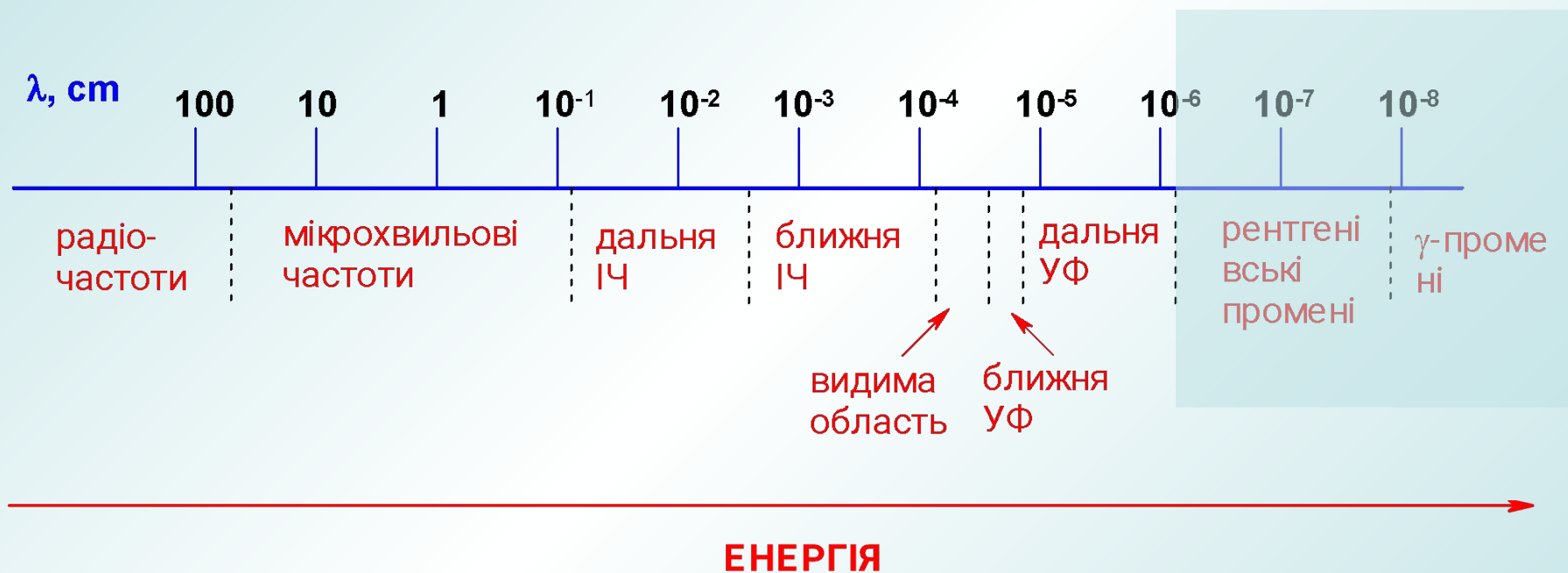
спектроскопічні методи дослідження

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

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



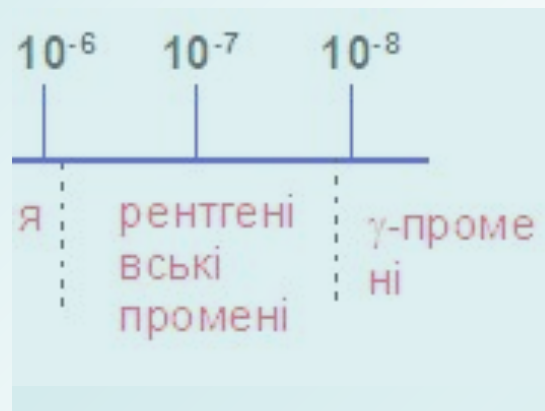
ШКАЛА ЕЛЕКТРОМАГНІТНИХ ВИПРОМІНЮВАНЬ





СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

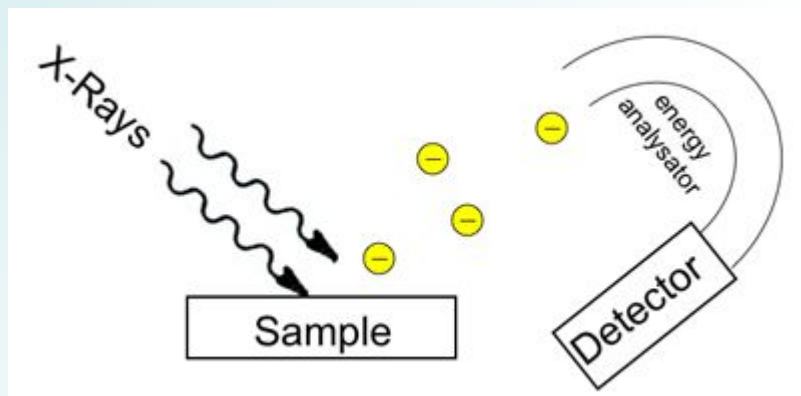
ЕЛЕКТРОНИ
ВНУТРІШНІХ
ЗОВНІШНІХ
ЕЛЕКТРОННИХ
ОБОЛОНОК



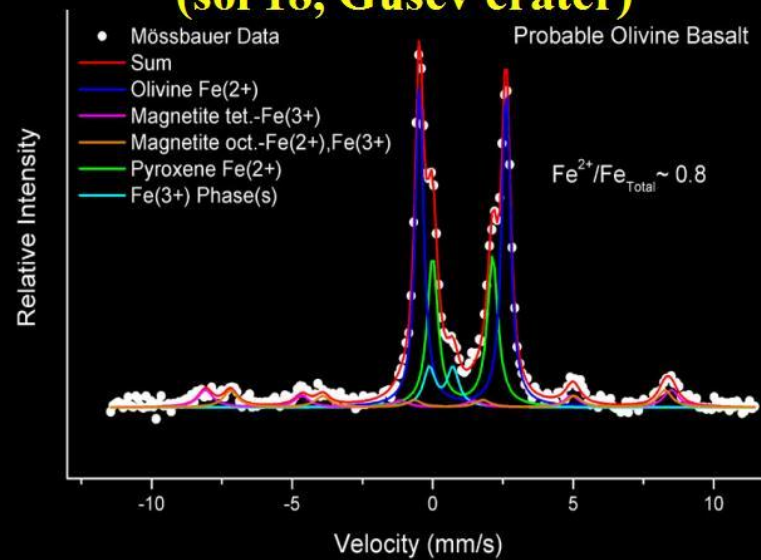
НУКЛОНИ В
ЯДРАХ

γ-РЕЗОНАНСНА
(МЕСБАУРІВСЬКА)
СПЕКТРОСКОПІЯ

ФОТОЕЛЕКТРОННА СПЕКТРОСКОПІЯ

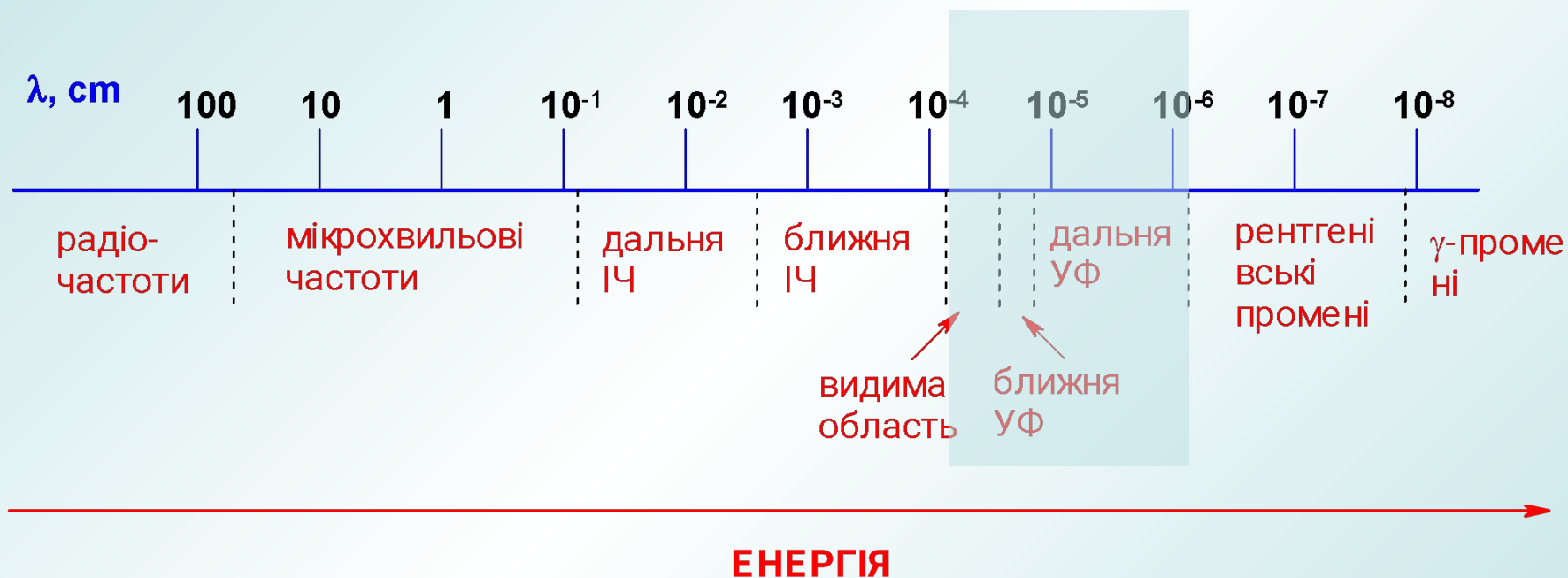


Mössbauer Spectrum of Adirondack (sol 18, Gusev crater)





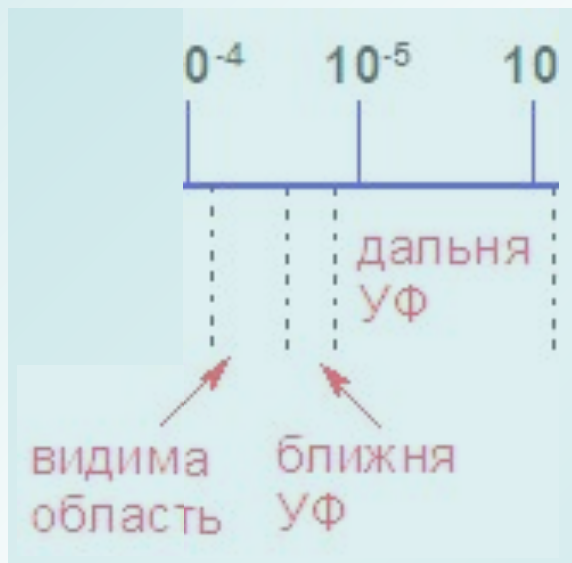
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ





СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

ЕЛЕКТРОНИ
ЗОВНІШНІХ
ЕЛЕКТРОННИХ
ОБОЛОНОК

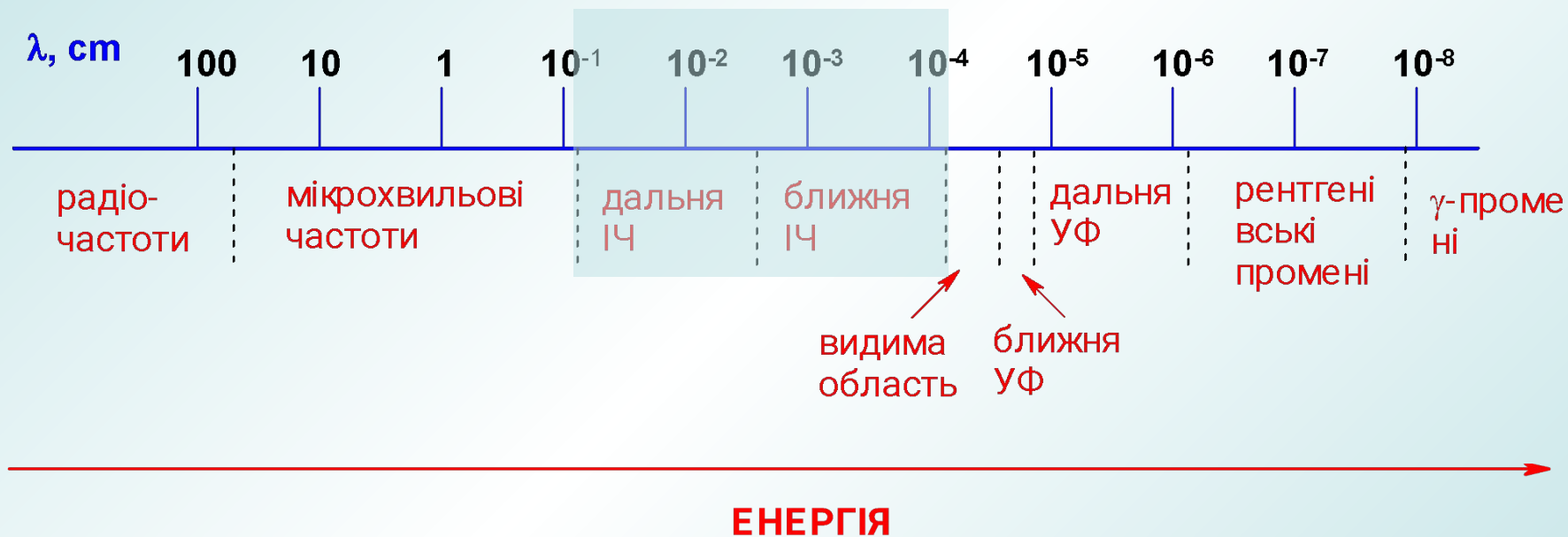


ЕЛЕКТРОННА
СПЕКТРОСКОПІЯ
(ВИДИМА І УФ)





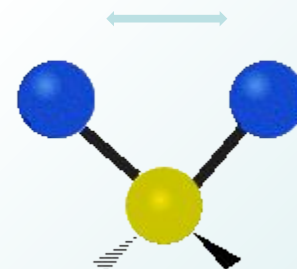
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ



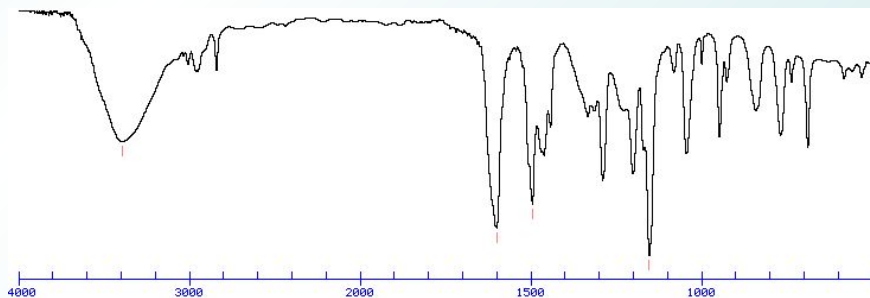


СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

КОЛИВАЛЬНІ
РІВНІ ЕНЕРГІЇ
МОЛЕКУЛ



ІНФРАЧЕРВОНА СПЕКТРОСКОПІЯ





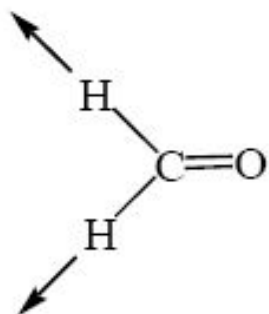
ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

- 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

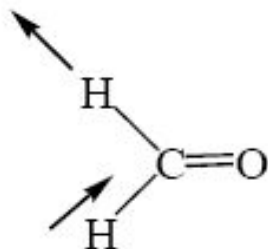


ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

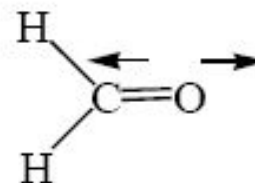
валентні коливання



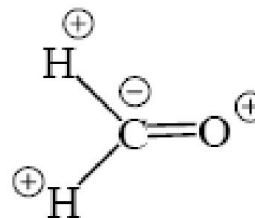
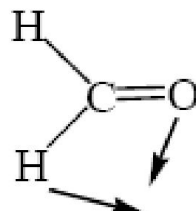
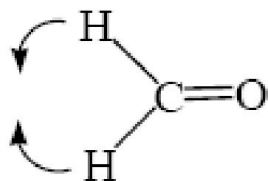
симетричні



асиметричні



деформаційні коливання

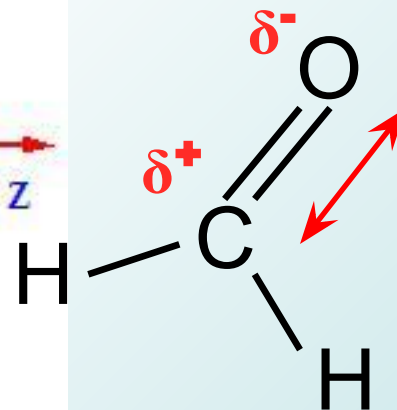
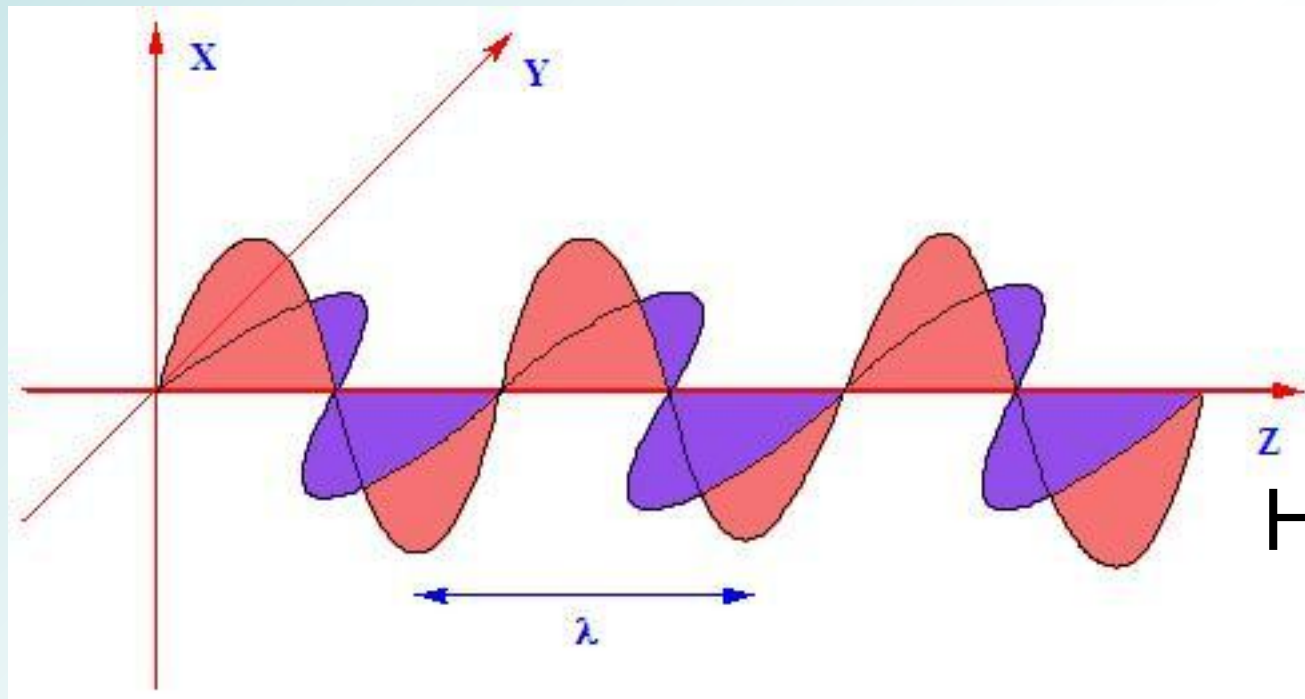


необхідною умовою є зміна дипольного моменту молекул в процесі коливань



ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

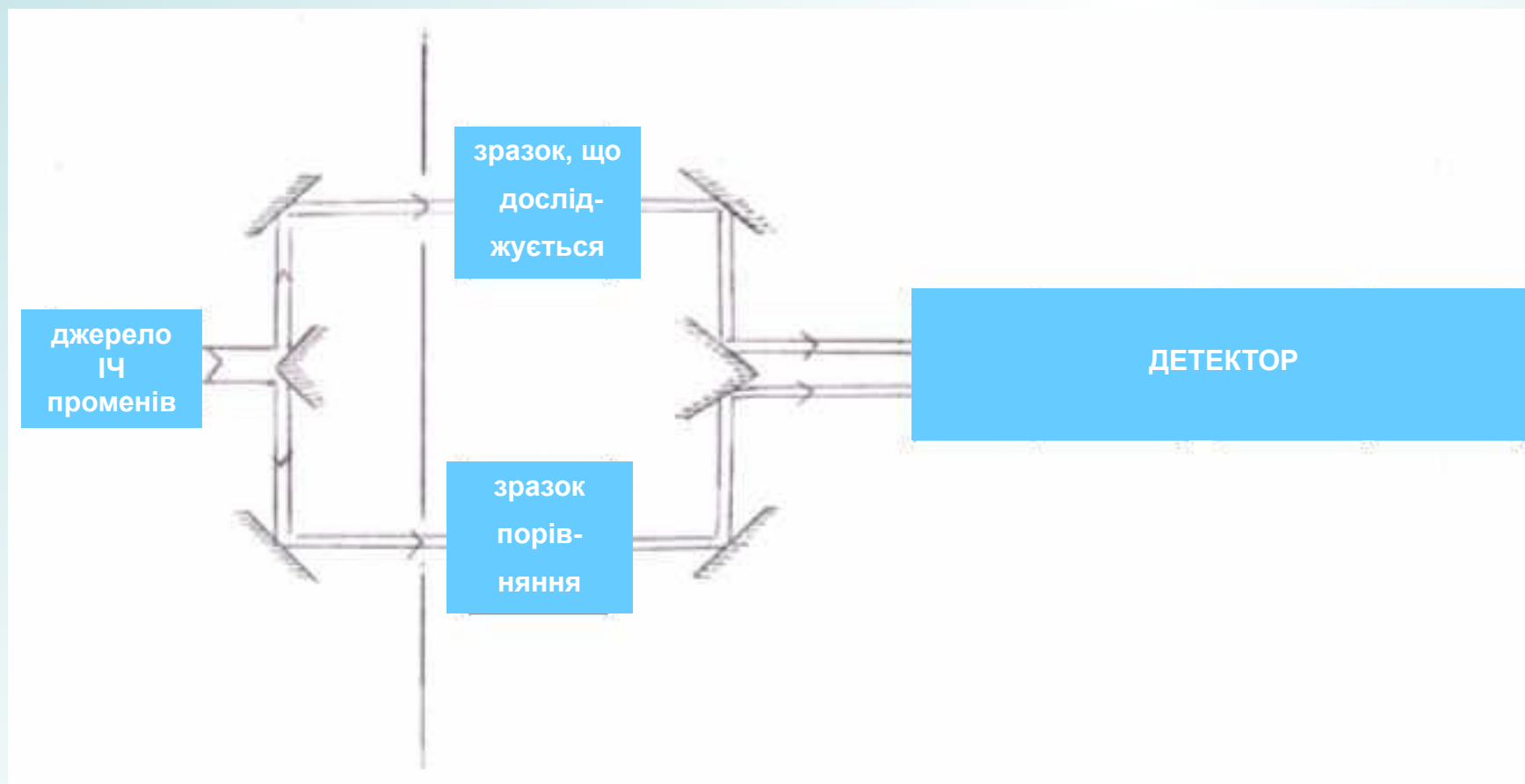
необхідною умовою є зміна дипольного моменту молекул в процесі коливань





ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

принципова схема приладу

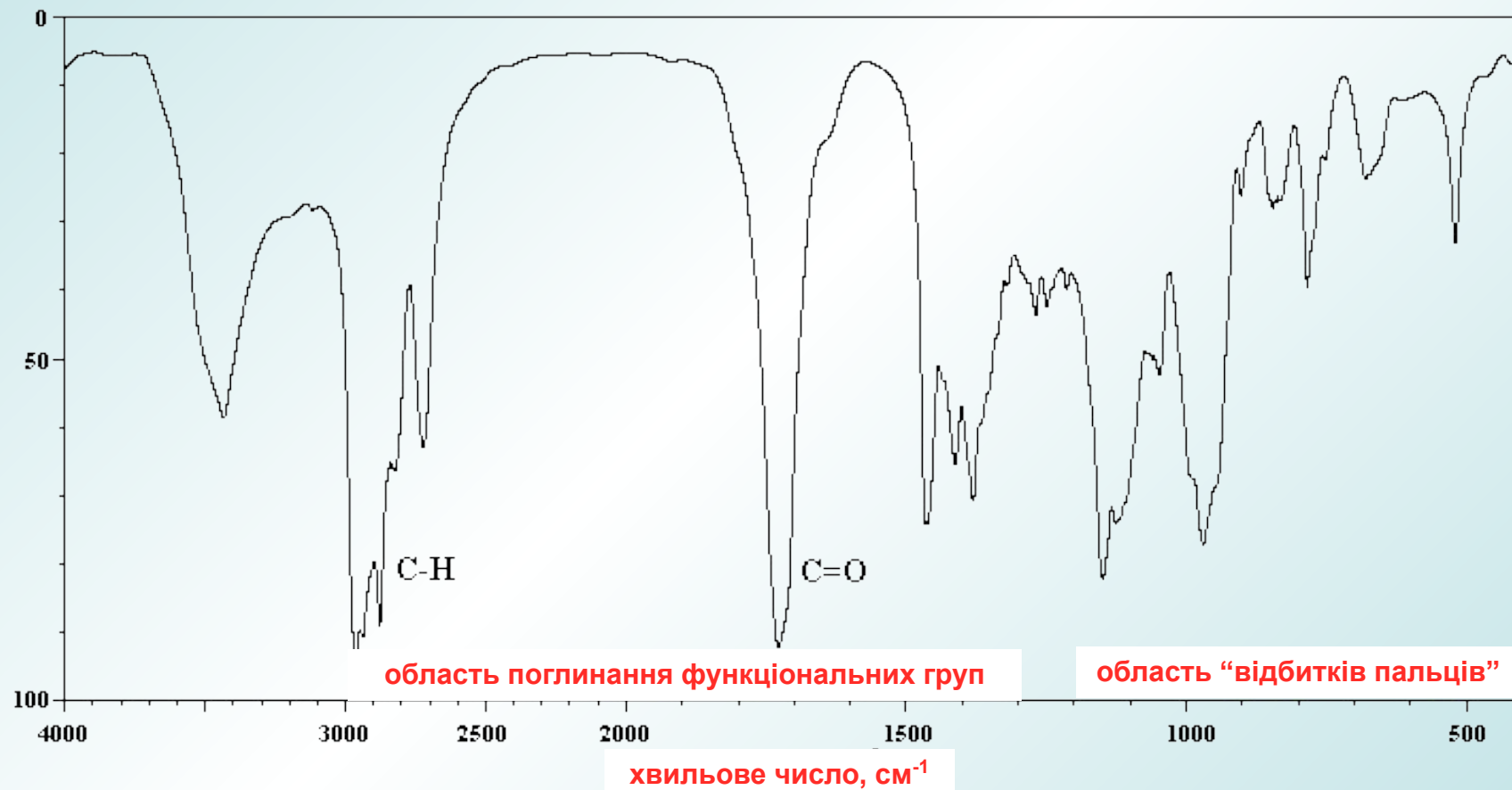




ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

типовий ІЧ-спектр

поглинання, %





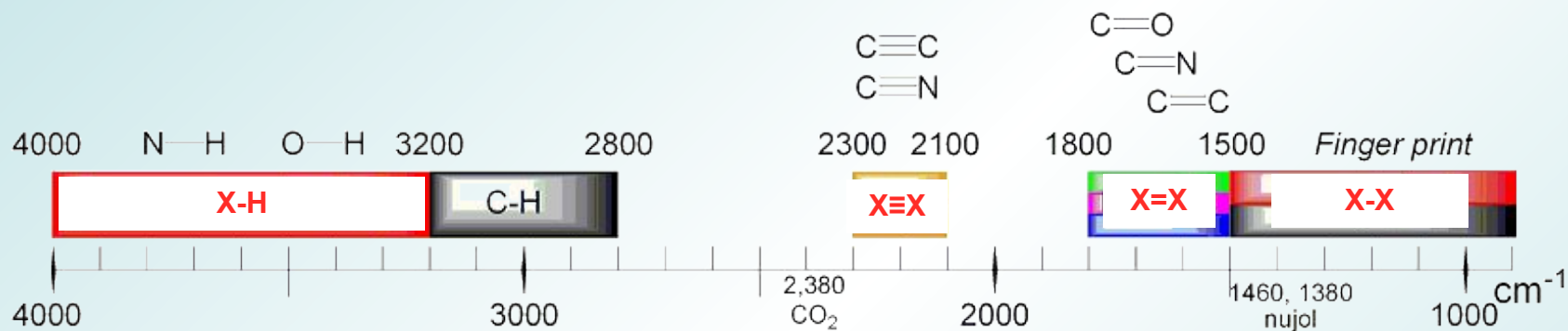
ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

**- ЧАСТОТИ ПОГЛИНАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ГРУП Є
ХАРАКТЕРИСТИЧНИМИ**



ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ

поглинання функціональних груп

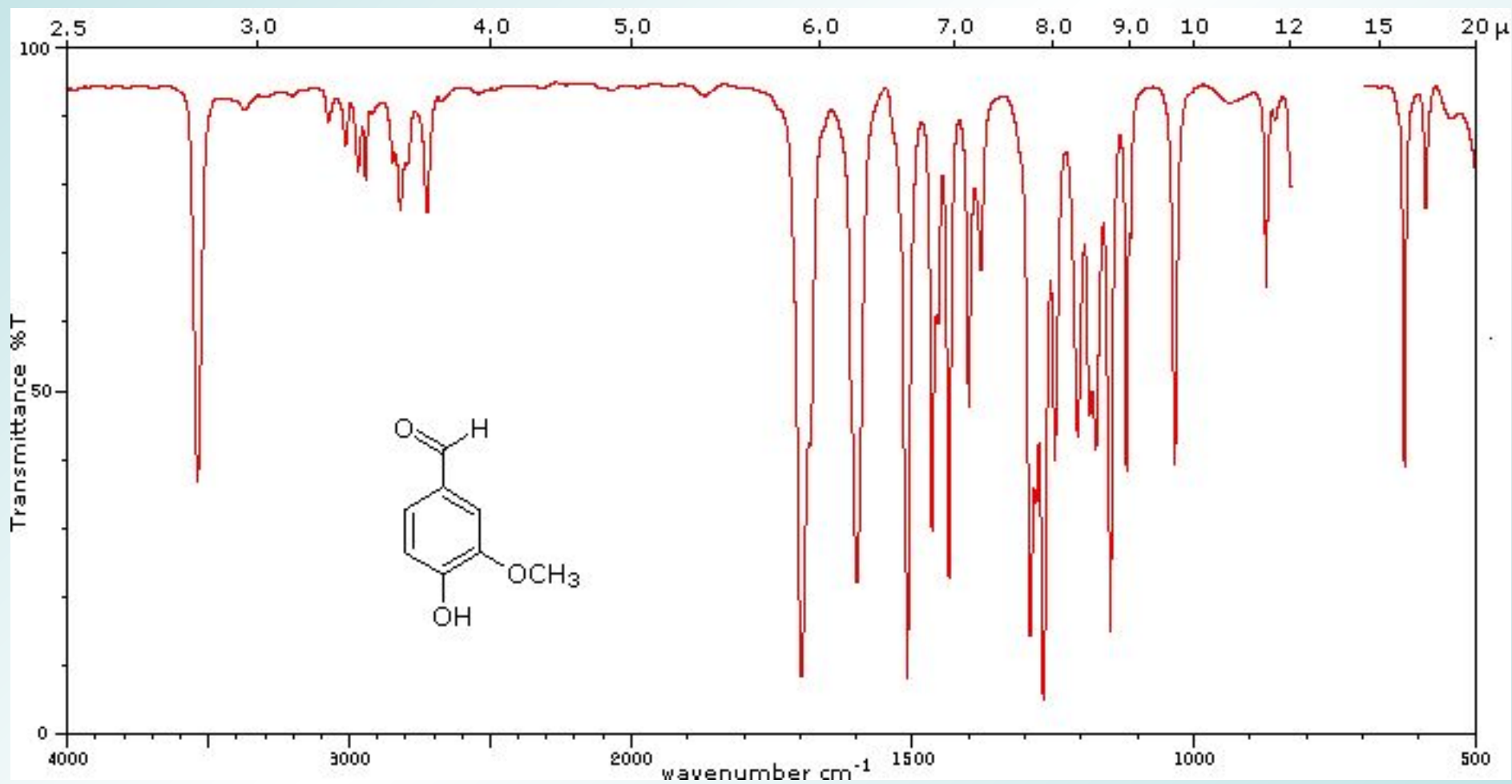


Double Bonds

Bond	Wavenumber/cm ⁻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

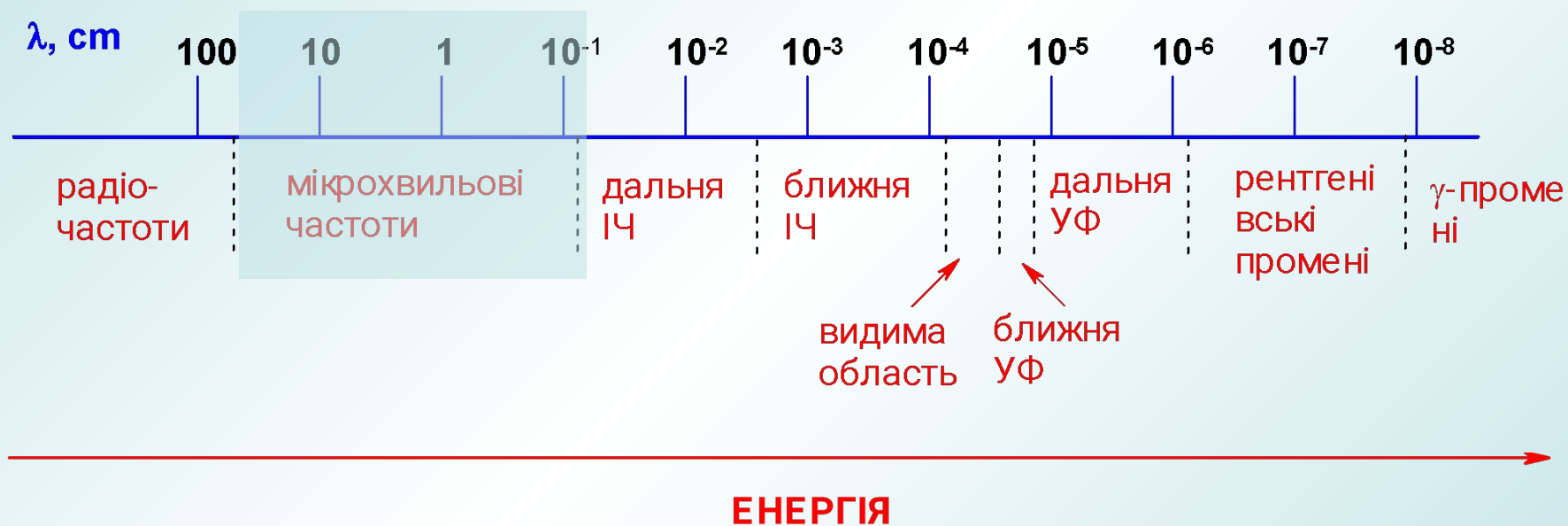


ІНФРАЧЕРВОНА (ІЧ) СПЕКТРОСКОПІЯ





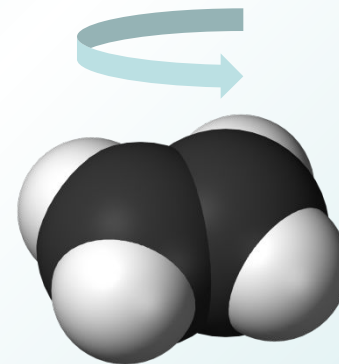
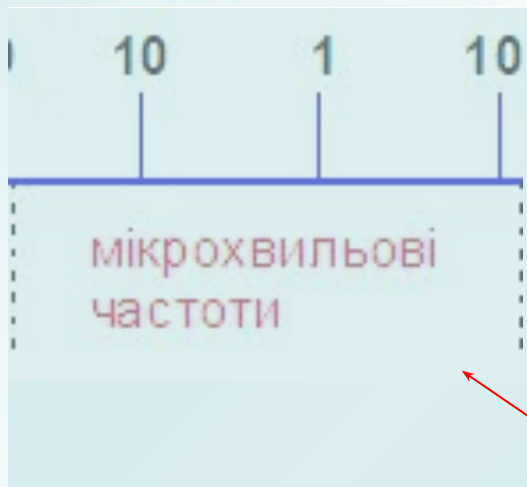
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ





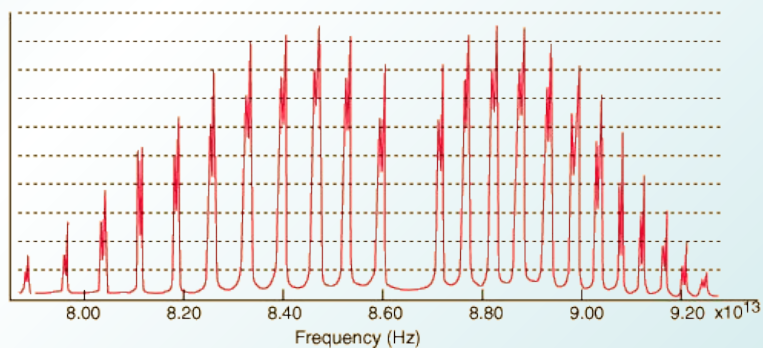
СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

ОБЕРТАЛЬНІ
РІВНІ ЕНЕРГІЇ
МОЛЕКУЛ



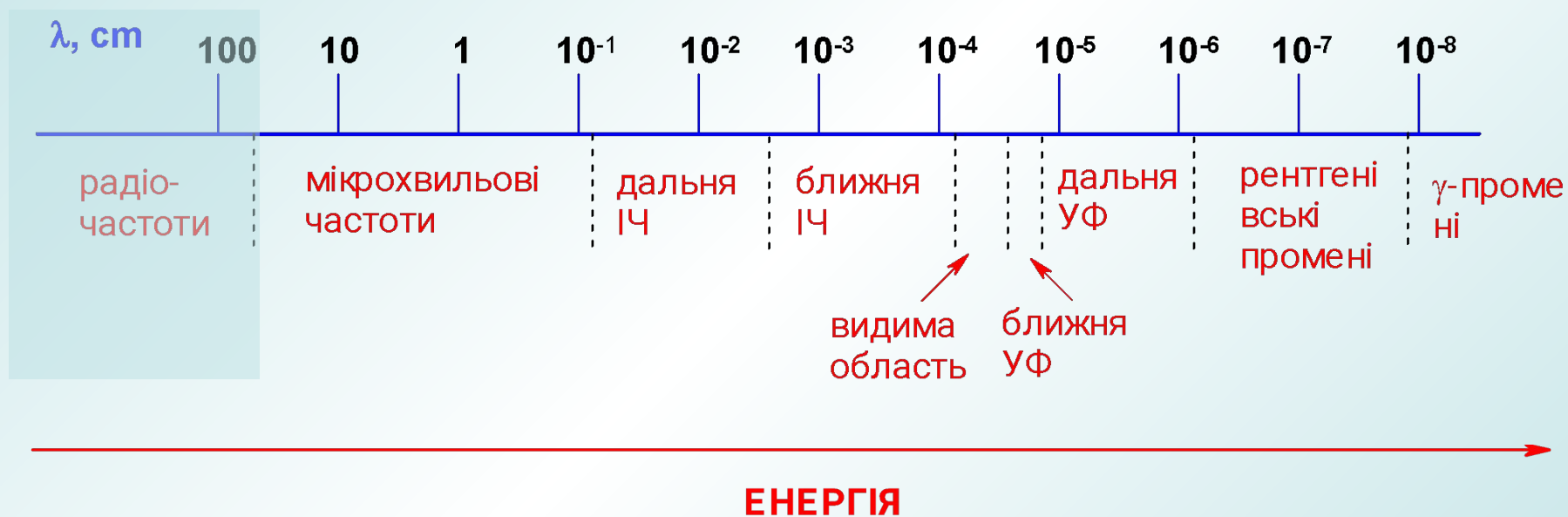
МІКРОХВИЛЬОВА
(ОБЕРТАЛЬНА)
СПЕКТРОСКОПІЯ

ТГц спектроскопія





СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

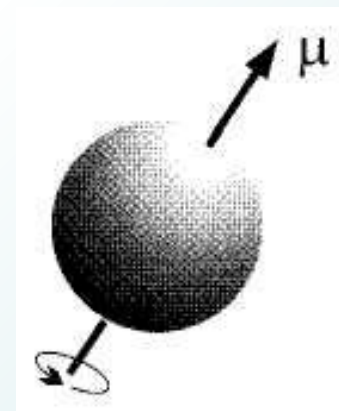
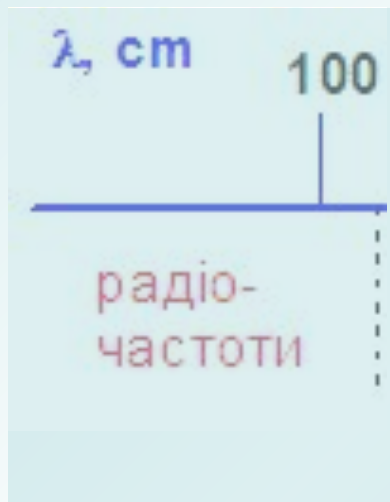




СПЕКТРОСКОПІЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

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

