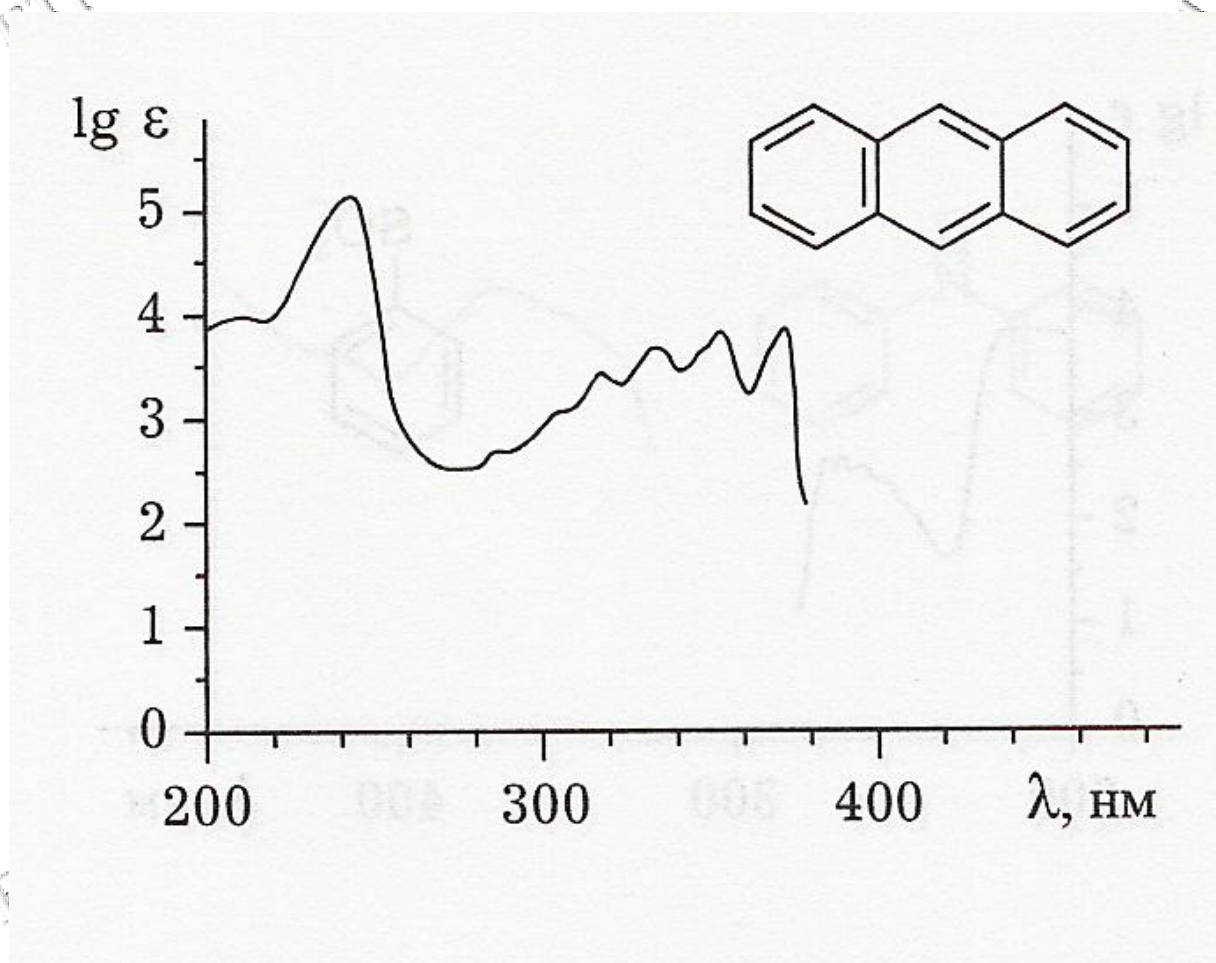


ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

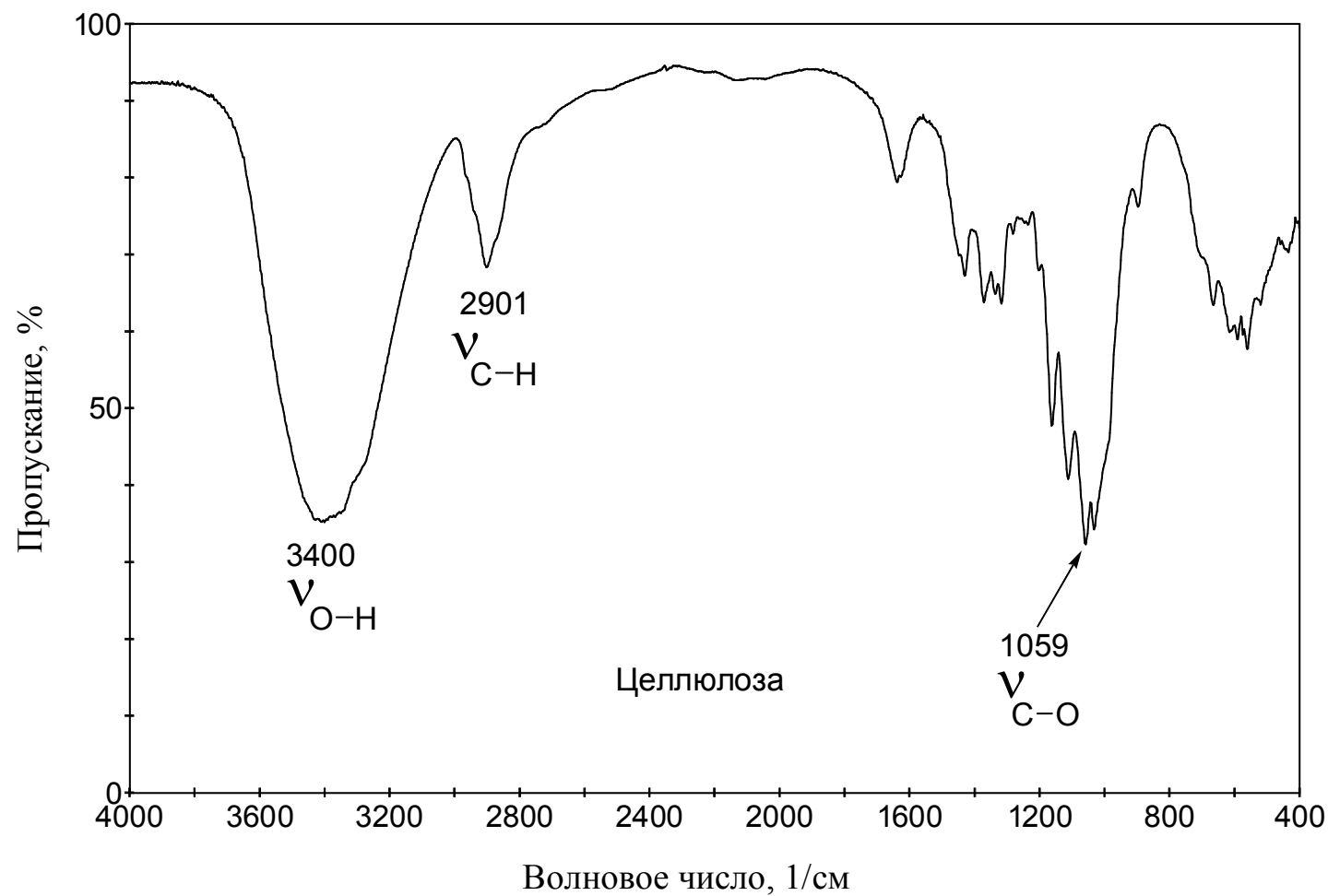
А. В. Васильев
Спектроскопия

А. В. Васильев
Спектроскопия

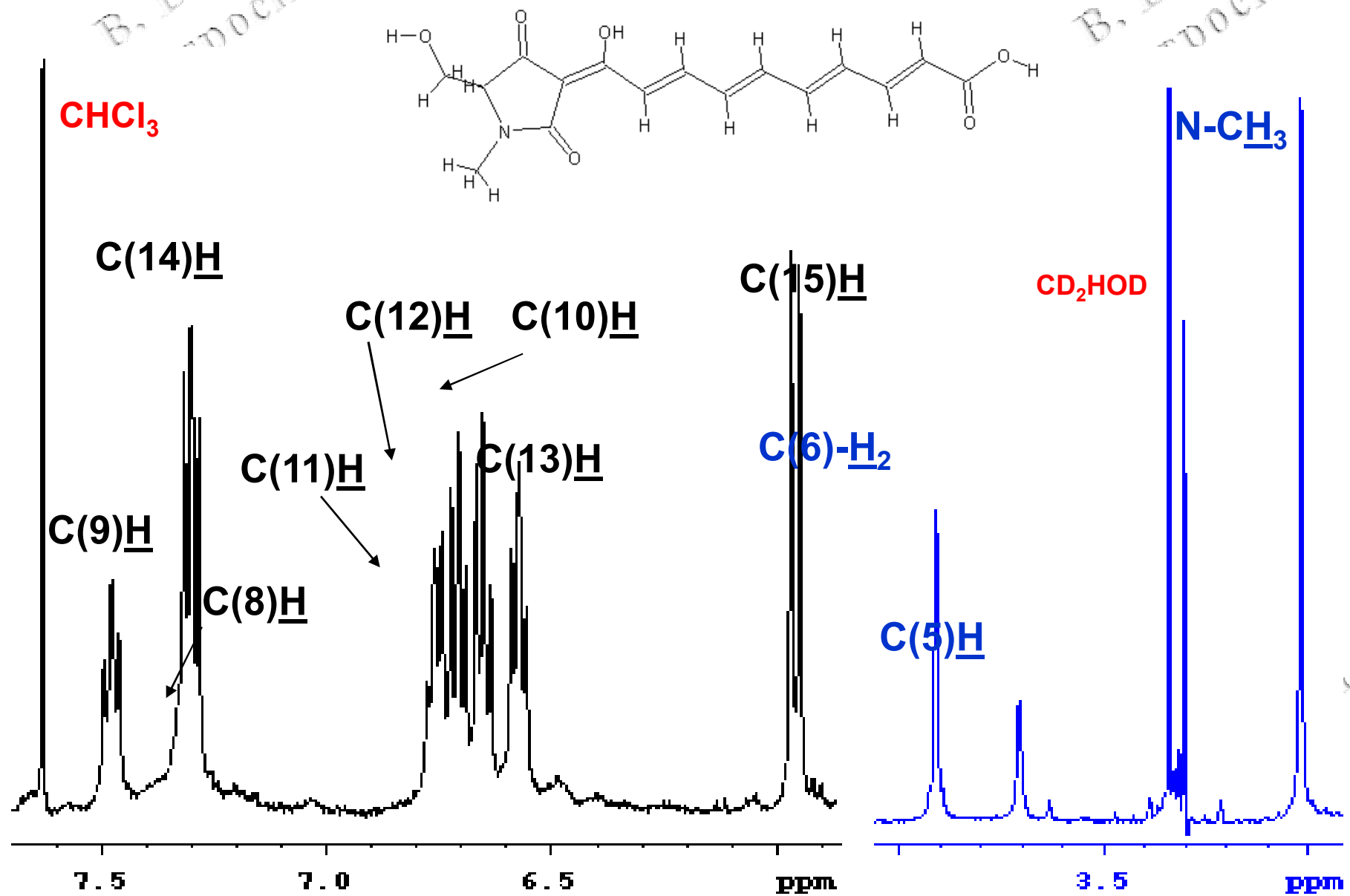
Электронный спектр антрацена



Инфракрасный спектр целлюлозы



Спектр ЯМР сложного природного соединения



Применение ФХМА в различных науках

- 1. Химия.**
- 2. Физика.**
- 3. Биология.**
- 4. Медицина.**
- 5. Материаловедение.**

Основные задачи, решаемые с помощью современных спектральных методов

1. Идентификация соединений – установление строения.
2. Определение качественного и количественного состава смесей неорганических и органических веществ.
3. Определение энергетических и геометрических характеристик атомов и молекул.
4. Изучение внутри- и межмолекулярных взаимодействий.
5. Исследование кинетических параметров и интермедиатов химических реакций.

Современные спектральные методы **физико-химического анализа** **органических соединений**

- 1. Электронная (ультрафиолетовая) спектроскопия.**
- 2. Инфракрасная спектроскопия.**
- 3. Масс-спектрометрия.**
- 4. Ядерный магнитный резонанс.**
- 5. Хроматография.**

Цель учебной дисциплины:

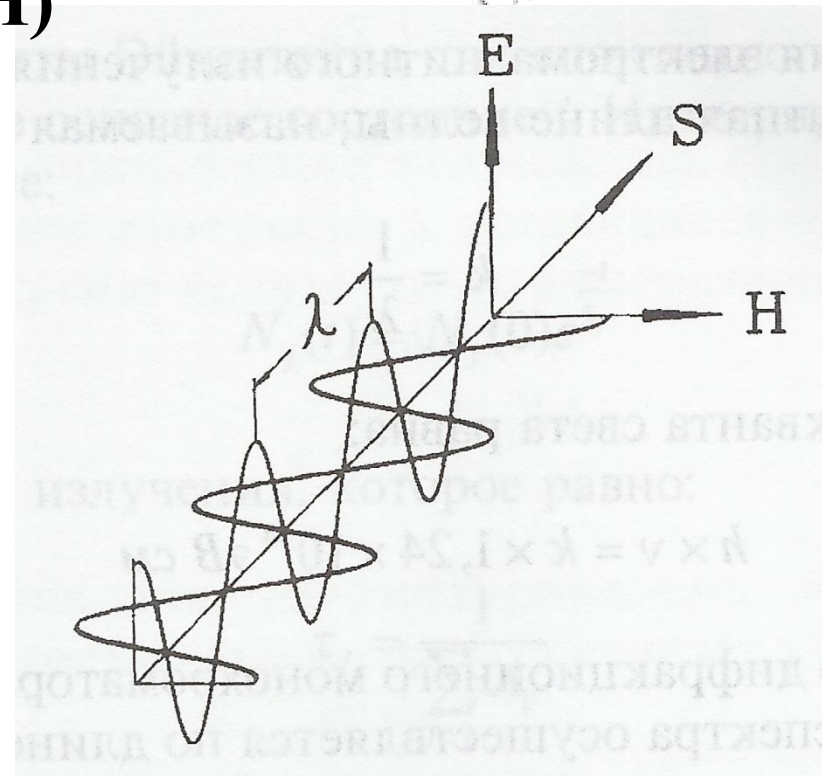
**Научить студентов использовать
современные инструментальные физико-
химические спектральные методы
исследования для качественного и
количественного анализа органических
веществ и продуктов химической
переработки древесины.**

Понятие о спектроскопии

Спектроскопия – физический метод исследования, занимающийся изучением закономерностей взаимодействия электромагнитного излучения (света) с химическим веществом.

Эти взаимодействия могут сопровождаться поглощением, излучением или рассеянием электромагнитного излучения.

**Свет – электромагнитная волна,
имеющая магнитную (H)
и электрическую (E)
составляющие.**



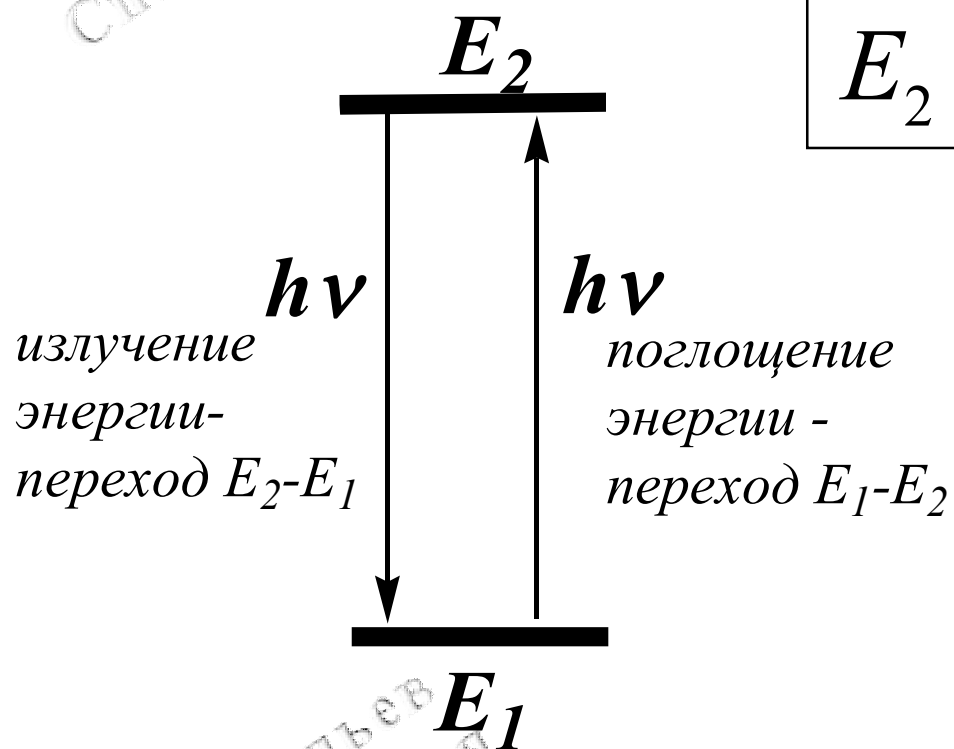
**Взаимодействие электромагнитного
колебания с химическим веществом
приводит к возбуждению переходов
между энергетическими уровнями
вещества (атома или молекулы).**

**Спектроскопия позволяет получать
сведения об энергетических
стационарных состояниях атомов или
молекул на основании переходов
между этими состояниями.**

Взаимодействие вещества и энергии

Энергия атомов и молекул квантована, т.е. атомная или молекулярная система может существовать только в определённых дискретных энергетических состояниях, переход между которыми возможен только скачкообразно.

Рассмотрим в молекуле два энергетических уровня E_1 и E_2 .



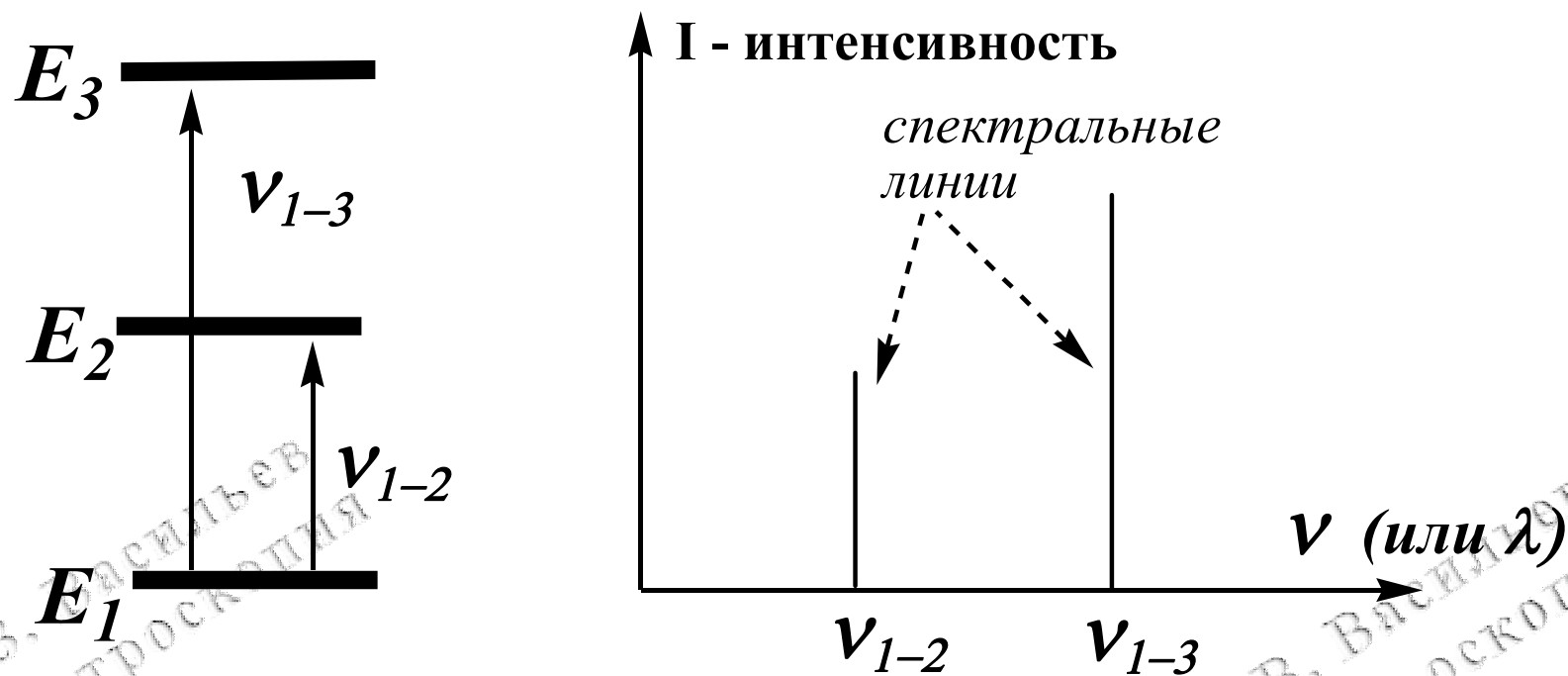
$$E_2 - E_1 = \Delta E = h\nu$$

ΔE – разность энергии двух уровней;
 h – постоянная Планка;
 ν – частота электромагнитного излучения.

Изучая переходы между энергетическими уровнями молекулы, можно составить энергетический спектр этой молекулы.

Определение понятия “спектр”

Спектр – зависимость интенсивности поглощения (излучения или рассеяния) электромагнитного излучения молекулы от частоты (или длины волны) излучения.



Связь энергии и излучения. Формула Планка

$$E = h \times \nu = \frac{h \times c}{\lambda}$$

E – энергия, $[E] = \text{Дж}$;

ν – частота света, $[\nu] = \text{с}^{-1} = \text{Гц}$;

λ – длина волны света, $[\lambda] = \text{м, см, нм (} 10^{-9}\text{м)}$;

h – постоянная Планка: $6.62 \times 10^{-34} \text{ Дж} \times \text{с}$;

c – скорость света в вакууме: $3 \times 10^8 \text{ м/с}$.

Волновое число $\nu = 1/\lambda \text{ см}^{-1}$ (обратные см.).

Энергетические уровни молекулы

Полная энергия молекулы:

$$E = E_{\text{эл.}} + E_{\text{кол.}} + E_{\text{вр.}}$$

Приближение Борна-Оппенгеймера.

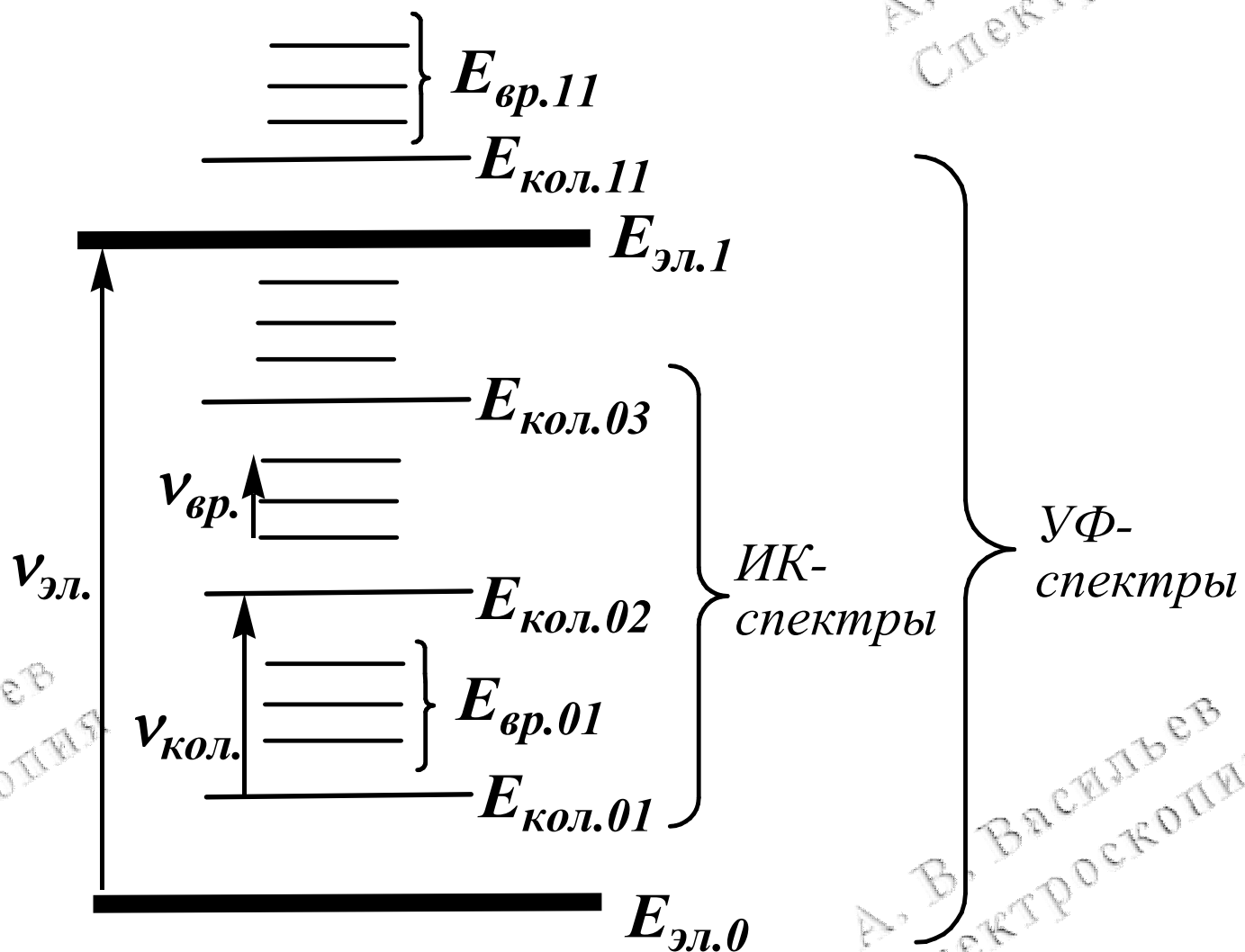
$E_{\text{эл.}}$ – энергия электронного движения;

$E_{\text{кол.}}$ – энергия колебательного движения;

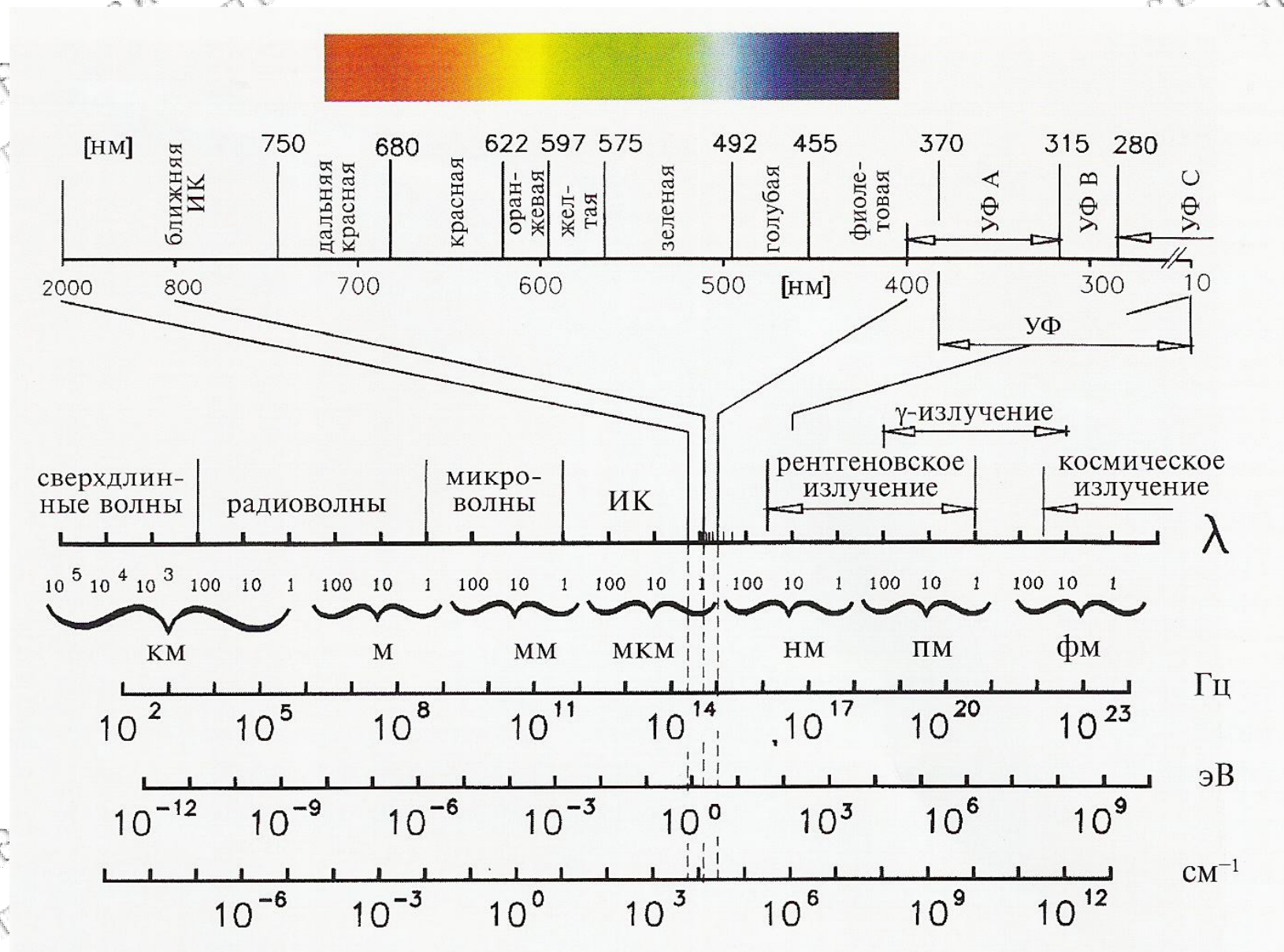
$E_{\text{вр.}}$ – энергия вращательного движения.

$$E_{\text{эл.}} \gg E_{\text{кол.}} \gg E_{\text{вр.}}$$

$$E_{\text{эл.}} : E_{\text{кол.}} : E_{\text{вр.}} \sim 1 : 1/20 : 1/700$$

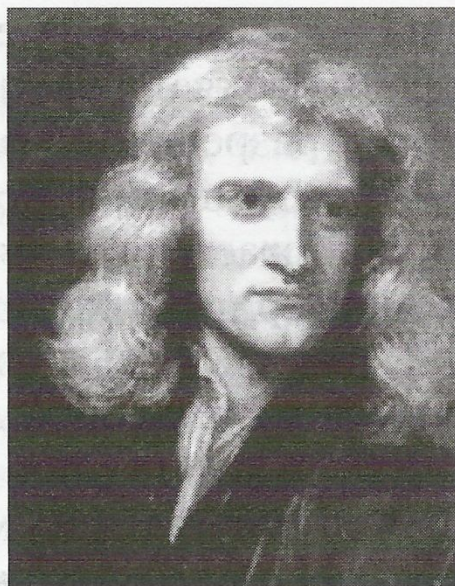


Шкала электромагнитных волн

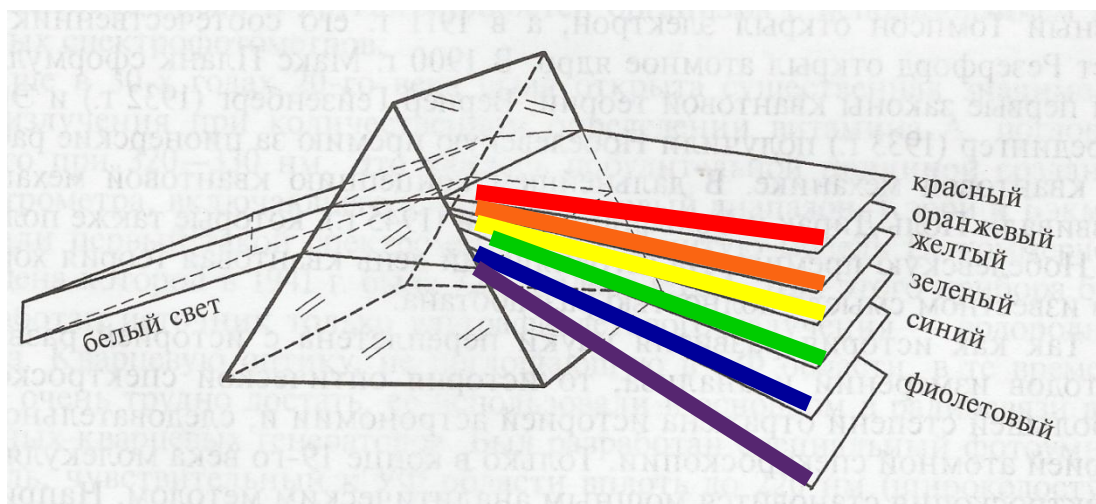


Исторические этапы открытия и развития спектроскопии

1666 г. – Исаак Ньютон использовал призму для разложения видимого света.



Сэр Исаак Ньютон
(1642—1727)



1800 г. – Гершель открыл ИК-излучение.

1801 г. – Риттер открыл УФ-излучение.

1887 г. – Томпсон открыл электрон.

**1901г. – открытие масс-спектрометрии
В. Кауфманом.**

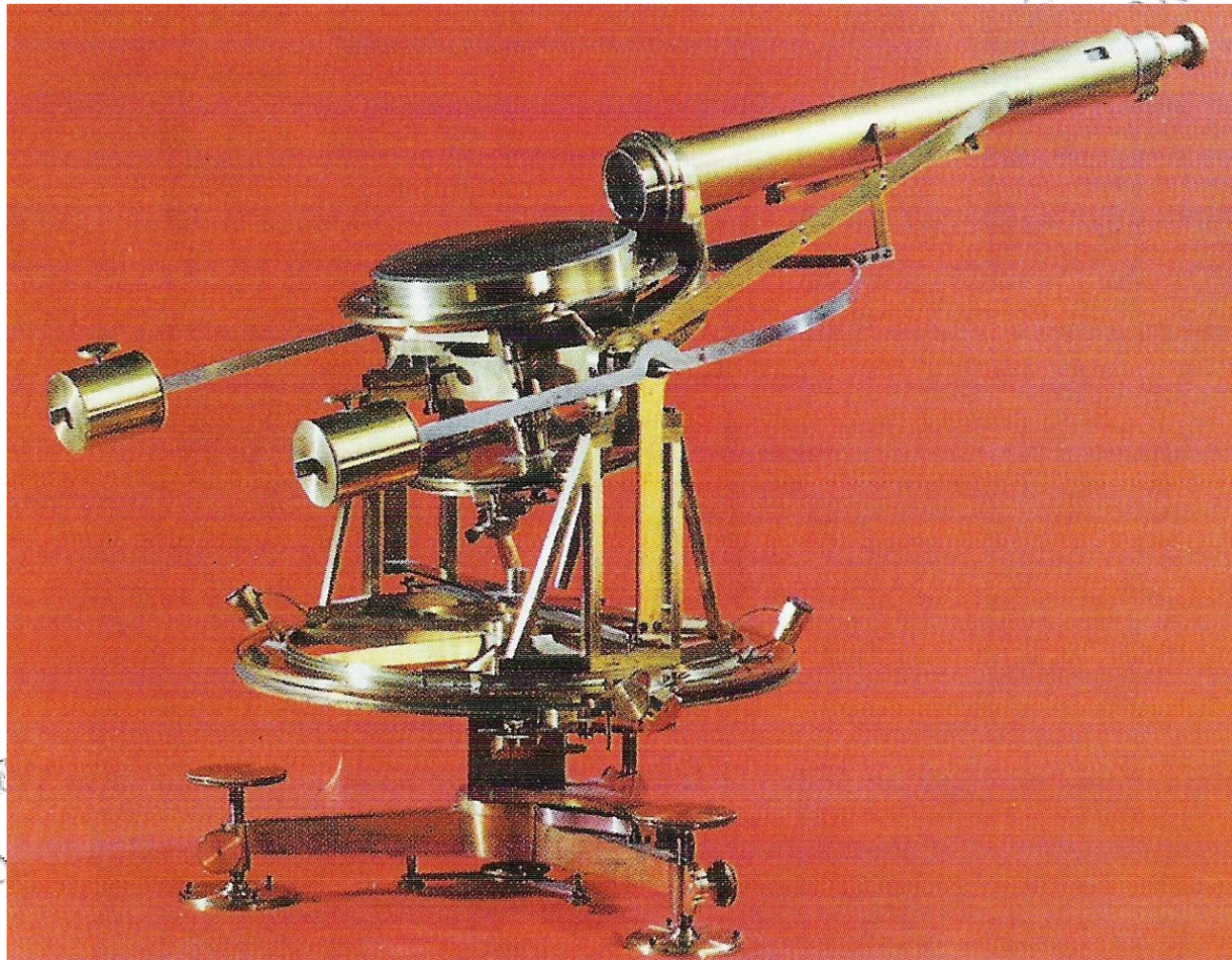
**1911 г. – Резерфорд ввёл понятие
“атомное ядро”.**

**1944 г. – Е.К. Завойский в Казани
открыл явление ЭПР.**

**1946 г. – Э. М. Персел и Ф. Блох (США)
открыли явление ЯМР.**

**1980-1990-е гг. – широкое внедрение мощной
компьютерной техники в практику
спектроскопии.**

Первый дисперсионный спектрограф
Фраунгофера (Германия, 1821 г.)



Современный ИК-спектрометр



Рекомендуемая общая литература

1. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений. М: Мир, 2006.
2. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М: Мир, 2003.
3. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ. М: Мир, 1992.
4. Иоффе Б.В., Костиков Р.Р., Разин В.В. Физические методы определения строения органических соединений. М.: Высш. школа, 1984.

5. Драго Р. Физические методы в химии, в 2-х т.
М.: Мир, 1981.

6. Сильверстейн Р., Басслер Г., Морил Т.
Спектрометрическая идентификация
органических соединений. М.: Мир, 1977.

7. Бранд Дж., Эглинтон Г. Применение
спектроскопии в органической химии. М.:
Мир, 1967.