

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя

**Москаленко О. В., Циганков С. А.,
Янченко В. О., Циганков А. С.**

Спектральні методи аналізу

Навчальний посібник

Ніжин – 2022

УДК 544.17(075.8)

М82

Рекомендовано до друку Вченою радою Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
Протокол № 13 від 03.06.2022 р.

Рецензенти:

Демченко А. М. – доктор фармацевтичних наук, професор кафедри хімії та фармації Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя;

Семеніхін А. В. – кандидат біологічних наук, доцент, завідувач кафедрою агрономії відокремленого підрозділу Національного університету біоресурсів і природокористування України «Ніжинський агротехнічний інститут»

Москаленко О. В., Циганков С. А., Янченко В. О., Циганков А. С.

М58 Спектральні методи аналізу. Ніжин: Видавництво НДУ імені Миколи Гоголя, 2022. 276 с.

У навчальному посібнику розглянуто основні методи ідентифікації речовини. Наведено принципіві схеми роботи спектрографів. Крім основних теоретичних положень у посібнику наведено великий обсяг тренувальних вправ, щодо тлумачення спектрів. Для поглиблення знань наведено контрольні та завдання для самостійної роботи.

Навчальний посібник призначений для студентів закладів вищої освіти, що навчаються за хімічним та фармацевтичним напрямком, а також може бути корисним для викладачів та вчителів хімії різнорівневих закладів освіти з поглибленим вивченням хімічних дисциплін.

© Видавництво НДУ ім. М.Гоголя, 2022

© Москаленко О.В., Циганков С.А.,

Янченко В.О., Циганков А.С., 2022

ЗМІСТ

Вступ.....	5
Основні поняття і визначення.....	7
РОЗДІЛ I. УФ-СПЕКТРОСКОПІЯ	
1.1. Природа і отримання спектру.....	9
1.2. Основні типи хромофорів.....	13
1.3. Дієнові системи.....	14
1.4. Полієнові системи.....	16
1.5. α,β -Ненасичені карбонові кислоти.....	18
1.6. Нітрогрупа.....	19
1.7. Ароматичні системи.....	19
РОЗДІЛ II. ІЧ-СПЕКТРОСКОПІЯ	
2.1. Історія відкриття методу.....	22
2.1. Теоретичні основи інфрачервоної спектроскопії.....	23
2.2. Інструментальне обладнання.....	27
2.2.1. Диспергуючі спектрометри.....	27
2.2.2. Монохроматори.....	29
2.2.3. Недиспергуючі прилади.....	31
2.3. Підготовка зразку до аналізу.....	33
2.4. Ідентифікація органічних сполук.....	36
2.5. Сфера застосування.....	48
РОЗДІЛ III. ЯМР ^1H- ТА ^{13}C-СПЕКТРОСКОПІЯ	
3.1. Історія відкриття методу.....	49
3.2. Теоретичні основи ЯМР-спектроскопії.....	49
3.3. Інструментальне обладнання.....	56
3.4. Сфери застосування.....	57
3.5. Ідентифікація органічних сполук.....	58
3.6. Визначення ступеня чистоти лікарських препаратів.....	78
3.7. Ідентифікація різних класів органічних сполук.....	78
3.8. Зразки спектрів ЯМР ^{13}C	85
3.9. Використання ЯМР ^{13}C в органічному синтезі.....	100
3.10. Аналіз <i>цис</i> - і <i>транс</i> -ізомерів в суміші.....	102
РОЗДІЛ IV. Рентгеноспектральний аналіз	
4.1. Історія відкриття методу.....	103
4.2. Сутність методу.....	104
4.3. Інструментальне обладнання.....	105
4.4. Рентгеноструктурний аналіз.....	109
4.5. Сфера застосування.....	109
РОЗДІЛ V. СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ	
5.1. Історія відкриття методу.....	111
5.2. Сутність методу.....	112
5.3. Апаратне обладнання.....	114
5.4. Спектрофотометр в ІЧ-області.....	114

5.5. Сфери застосування	116
РОЗДІЛ VI. МАС-СПЕКТРОМЕТРІЯ	
6.1. Природа і отримання мас-спектрів.....	118
6.2. Молекулярний йон	121
6.3. Основні напрямки фрагментації	123
VII. ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ ОБРОБКИ СПЕКТРІВ.	
7.1. Загальні підходи до обробки спектрів ЯМР	129
7.2. Взаємодія з програмою	131
7.3. Збір даних.....	132
7.3.1. Визначення наборів даних.....	132
7.3.2. Читання та редагування параметрів	132
7.3.2.1 Групи параметрів.....	132
7.3.2.2 Важливі параметри збору даних.....	133
7.3.3. Замикання і прокладка	134
7.3.4. Налаштування зонда	135
7.3.5. Отримання даних.....	135
7.4. Обробка даних	135
7.4.1 Від FID до спектру	135
7.4.1.1 Перетворення Фур'є	135
7.4.1.2 Віконні функції.....	135
7.4.2. Маніпуляції зі спектром	136
7.4.3. Фазова корекція	136
7.4.4 Корекція базової лінії.....	136
7.4.5. Калібрування/посилання	136
7.4.6 Вибір піків.....	137
7.4.7. Інтеграція.....	137
7.4.8 Інші особливості.....	137
7.4.8.1 Кілька дисплеїв.....	137
7.4.8.2 Вимірювання значень J.....	138
7.4.8.3 Зразок інформації	138
7.4.8.4 Молекулярні структури	138
7.5. Побудова графіка.....	138
СПІЛЬНЕ ЗАСТОСУВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ МЕТОДІВ.....	142
РОЗДІЛ VIII. ЗАДАЧІ ТА ВПРАВИ	143
ДОДАТКИ	
Таблиця 1. Характерні смуги поглинання для різних класів органічних сполук	259
Таблиця 2. Дані ¹ H ЯМР-спектроскопії	267
Таблиця 3. Дані ¹³ C ЯМР-спектроскопії	270
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	273

Навчальне видання

Москаленко О.В., Циганков С.А.,
Янченко В.О., Циганков А.С.

Спектральні методи аналізу

Навчальний посібник

Технічний редактор – І. П. Борис

Видання друкується за авторським редагуванням

Підписано до друку 06.09.2022 р.
Гарнітура Times New Roman
Замовлення № 617

Формат 60x84/16
Обл.-вид. арк. 6,83
Ум. друк. арк. 16,10

Папір офсетний
Тираж 50 прим.



Видавництво
Ніжинського державного університету
імені Миколи Гоголя.
м. Ніжин, вул. Воздвиженська, 3А
(04631) 7-19-72
E-mail: vidavn_ndu@ukr.net

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи
ДК № 2137 від 29.03.05 р.