

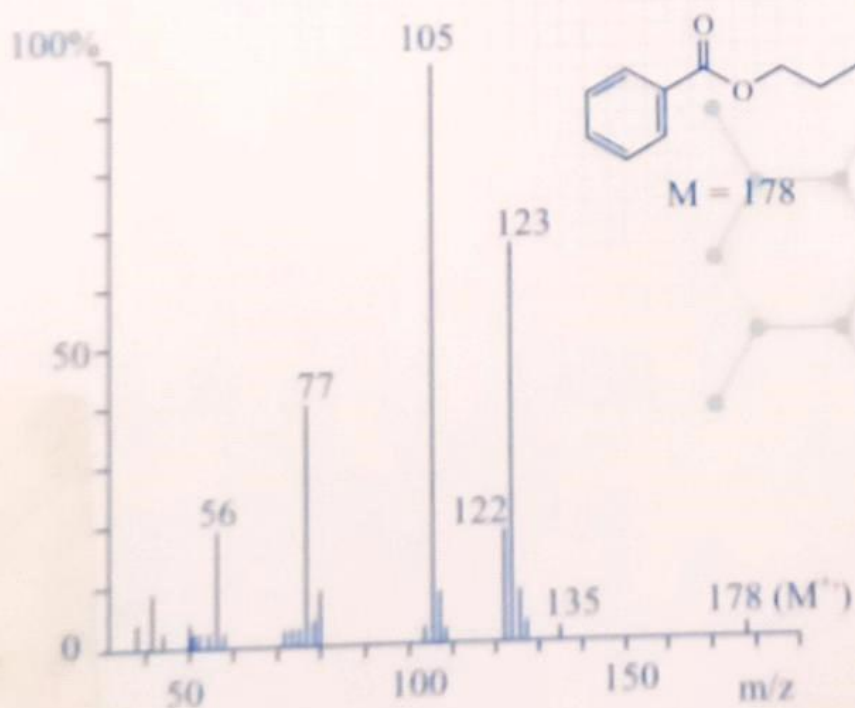


TRƯỜNG ĐẠI HỌC CÔNG NGHIỆP HÀ NỘI

NGUYỄN THỊ THANH MAI (Chủ biên)
NGUYỄN THẾ HỮU - NGUYỄN NGỌC THANH

GIÁO TRÌNH

CÁC PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH VẬT LÝ TRONG HOÁ HỮU CƠ



NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

TRƯỜNG ĐẠI HỌC CÔNG NGHIỆP HÀ NỘI

NGUYỄN THỊ THANH MAI (Chủ biên)
NGUYỄN THẾ HỮU – NGUYỄN NGỌC THANH

GIÁO TRÌNH

**CÁC PHƯƠNG PHÁP
PHÂN TÍCH VẬT LÝ
TRONG HOÁ HỮU CƠ**



NHÀ XUẤT BẢN ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

MỤC LỤC

	<i>Trang</i>
LỜI NÓI ĐẦU	5
Chương 1. KHÁI QUÁT VỀ CÁC PHƯƠNG PHÁP PHỔ	7
1.1. Bức xạ điện từ	7
1.2. Sự tương tác giữa vật chất và bức xạ điện từ	9
1.3. Vùng phổ quang học	10
1.4. Định luật Lambert – Beer	11
1.5. Nguyên lí cấu tạo quang phổ kế	12
Câu hỏi ôn tập chương 1	13
Chương 2. PHƯƠNG PHÁP PHỔ KÍCH THÍCH ELECTRON	14
2.1. Bản chất của các kích thích electron	14
2.2. Quy tắc lựa chọn trong phổ electron	17
2.3. Nguyên lí Franck – Condon	18
2.4. Phổ kế UV – Vis	19
2.5. Dung môi	20
2.6. Chuẩn bị mẫu và đo phổ	21
2.7. Nhóm mang màu (chromophore) và nhóm trợ màu (auxochrome)	21
2.8. Phổ đỏ	24
2.9. Phổ tử ngoại và khả kiến của hợp chất hữu cơ	25
2.10. Ứng dụng của phương pháp phổ UV–Vis	31
Câu hỏi ôn tập chương 2	34
Chương 3. PHƯƠNG PHÁP PHỔ HỒNG NGOẠI	36
3.1. Nguồn gốc bức xạ hồng ngoại	36
3.2. Đại cương về phương pháp phổ hồng ngoại	37
3.3. Hấp thụ hồng ngoại của một số hợp chất hữu cơ	53
3.4. Kỹ thuật thực nghiệm và ứng dụng của phương pháp quang phổ hồng ngoại	67
Câu hỏi ôn tập chương 3	74
Chương 4. PHƯƠNG PHÁP PHỔ RAMAN	76
4.1. Khái quát về phổ Raman	76
4.2. Đặc tính của các vạch Raman và sự chuyển dịch Raman	79
4.3. Lí thuyết của hiệu ứng Raman và phổ Raman	79
4.4. Phổ quay Raman thuần túy	84
4.5. Dạng phân tử và phổ quay Raman	86

4.6. Phổ dao động quay Raman	86
4.7. Quy tắc loại trừ	87
4.8. Phổ Raman của hợp chất hữu cơ	87
4.9. Phổ Raman của hợp chất vô cơ	90
4.10. Máy phổ Raman	91
4.11. Ứng dụng của phổ Raman	93
4.12. Sự khác nhau giữa phổ Raman và phổ huỳnh quang	95
4.13. Sự khác nhau giữa phổ Raman và phổ hồng ngoại	96
Câu hỏi ôn tập chương 4	97
Chương 5. PHƯƠNG PHÁP PHỔ CỘNG HƯỞNG TỪ HẠT NHÂN	98
5.1. Tính chất từ của hạt nhân	98
5.2. Tính chất của hạt nhân từ trong từ trường ngoài	99
5.3. Quá trình hồi phục spin	105
5.4. Kỹ thuật thực nghiệm	106
5.5. Độ chuyển dịch hoá học	110
5.6. Tương tác spin – spin	116
5.7. Khử tương tác spin – spin	120
5.8. Đường cong tích phân tín hiệu	120
5.9. Phân tích phổ cộng hưởng từ hạt nhân phân giải cao	121
5.10. Các phương pháp hỗ trợ cho phân tích phổ	124
5.11. Ứng dụng phổ cộng hưởng từ hạt nhân nghiên cứu động học	126
5.12. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân của các hạt nhân khác	128
5.13. Phổ ^1H NMR của các hợp chất hữu cơ	129
5.14. Phổ ^{13}C NMR của các hợp chất hữu cơ	141
5.15. Phổ COSY (phổ tương quan ^1H – ^1H)	151
5.16. Phổ ^1H – ^{13}C COSY để xác định cacbon: phổ HETCOR	152
5.17. Phổ ^1H – ^{13}C COSY để phát hiện proton: phổ HMQC	153
5.18. Sự tương quan dị hạt nhân ^1H – ^{13}C khoảng cách dài để phát hiện proton: phổ HMBC	154
Câu hỏi ôn tập chương 5	157
Chương 6. PHƯƠNG PHÁP PHỔ KHỐI LƯỢNG	166
6.1. Cơ sở của phương pháp phổ khối lượng	166
6.2. Cơ sở kỹ thuật của phương pháp phổ khối lượng	174
6.3. Phân loại các ion và ý nghĩa của chúng	184
6.4. Cơ chế phân mảnh phân tử	188
6.5. Khối phổ của một số hợp chất hữu cơ	190
Câu hỏi ôn tập chương 6	201
TÀI LIỆU THAM KHẢO	204

LỜI NÓI ĐẦU

Giáo trình *Các phương pháp phân tích vật lí trong hoá hữu cơ* gồm 6 chương, đề cập đến các nội dung: khái quát về các phương pháp phổ, phương pháp phổ kích thích electron, phương pháp phổ hồng ngoại, phương pháp phổ Raman, phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân và phương pháp phổ khối lượng.

Giáo trình được dùng làm tài liệu giảng dạy và học tập cho giảng viên và sinh viên ngành Công nghệ Hoá học của Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội, đồng thời cũng được sử dụng làm tài liệu tham khảo cho sinh viên các trường đại học, các viện và những ai quan tâm đến lĩnh vực hoá học và các ngành liên quan.

Chúng tôi xin chân thành cảm ơn các đồng nghiệp đã đóng góp nhiều ý kiến quý báu. Mặc dù đã có nhiều cố gắng, nhưng giáo trình không thể tránh khỏi thiếu sót. Chúng tôi rất mong nhận được ý kiến đóng góp, xây dựng để nội dung giáo trình ngày càng hoàn thiện hơn.

CÁC TÁC GIẢ