

Физико-химические методы
исследования структуры
органических соединений

Типы методов

Прямые

- PCA (x-ray)
- SEM/TEM

Косвенные

- УФ – спектроскопия
- MS
- ИК-спектроскопия
- ЯМР-спектроскопия
- другая фигня

Рентгеноструктурный Анализ

Плюсы

1. Сразу дает структуру

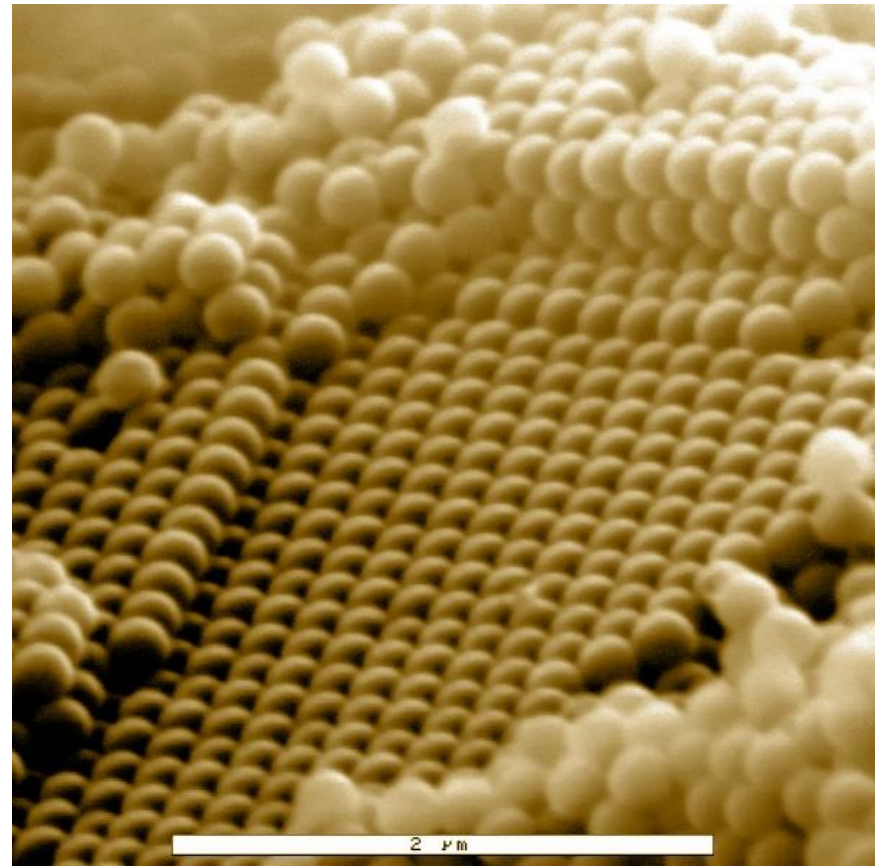
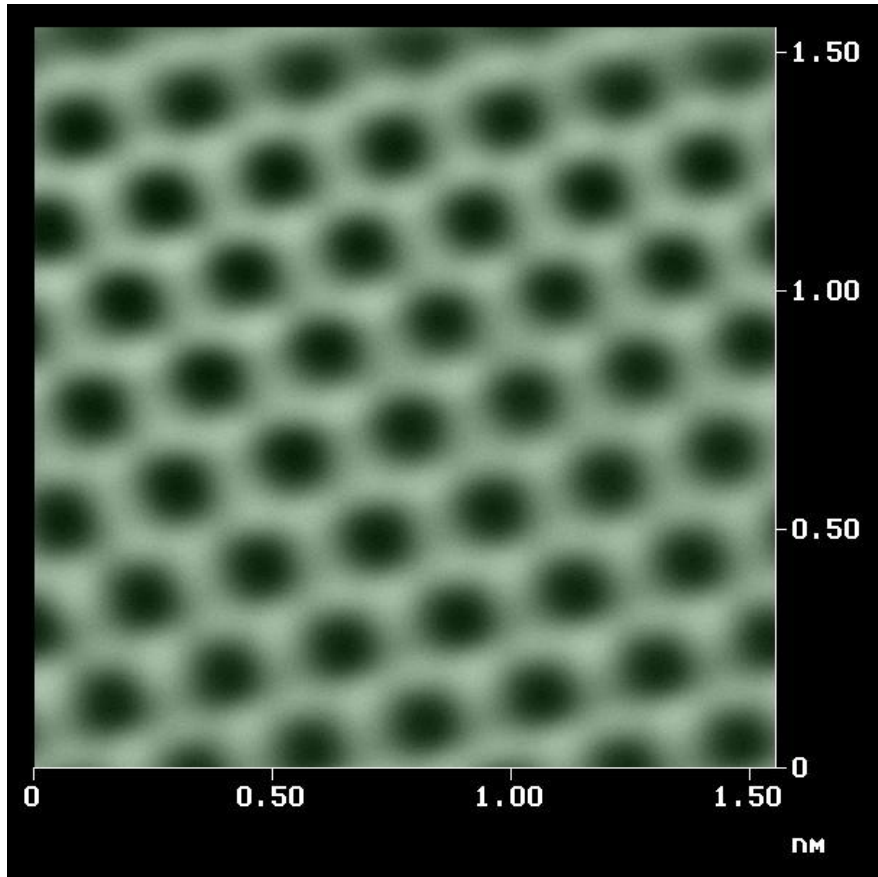
Минусы

1. Нужен монокристалл
2. Данные о молекуле – в кристалле, как ведет себя молекула в растворе – данных не дает
3. **Очень** медленный – требует несколько часов для регистрации

Transition Electron Microscopy Scanning Electron Microscopy



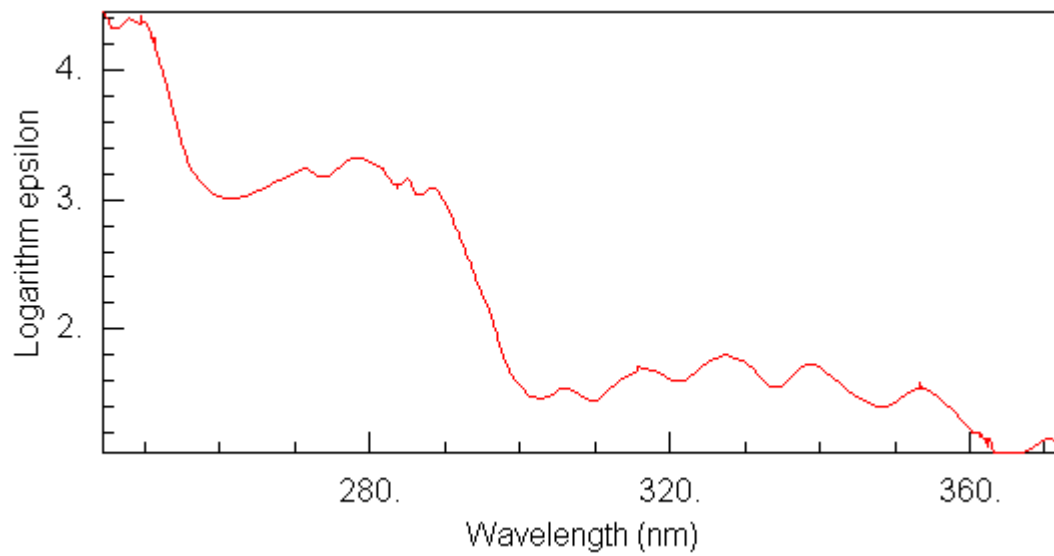
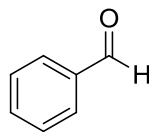
Polystyrene latex



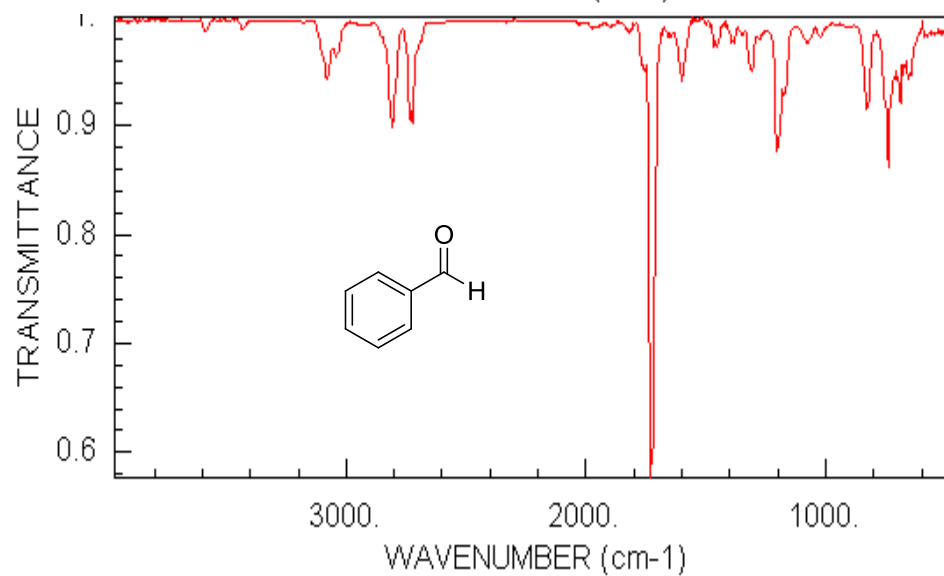
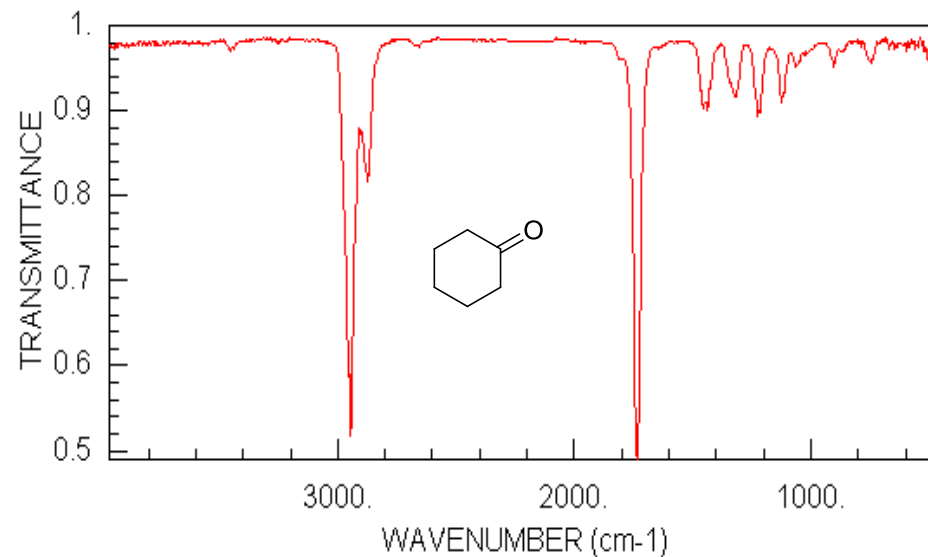
Косвенные методы

Четверо слепых пришли в зоопарк и навестили слона. Один слепой потрогал его бок и сказал: „Слон, как стена“. Другой слепой потрогал хобот и сказал: „Слон, как змея“. Следующий слепой потрогал ногу и сказал: „Слон, как колонна“. Последний слепой пощупал хвост и сказал: „Слон, как швабра“. И затем четверо слепых начали драться, так как каждый считал свое мнение правильным. Каждый понял только ту часть, которой коснулся; никто не понял целого

УФ-спектроскопия



ИК-Спектроскопия



ИК-спектроскопия

Характеристические области

$C=C$ – 1600-1700 cm^{-1}

$C=O$ – 1600-1800 cm^{-1}

$C\equiv N$ – 2240-2260 cm^{-1}

$C\equiv C$ – 3200-3300 cm^{-1}

Масс-спектрометрия

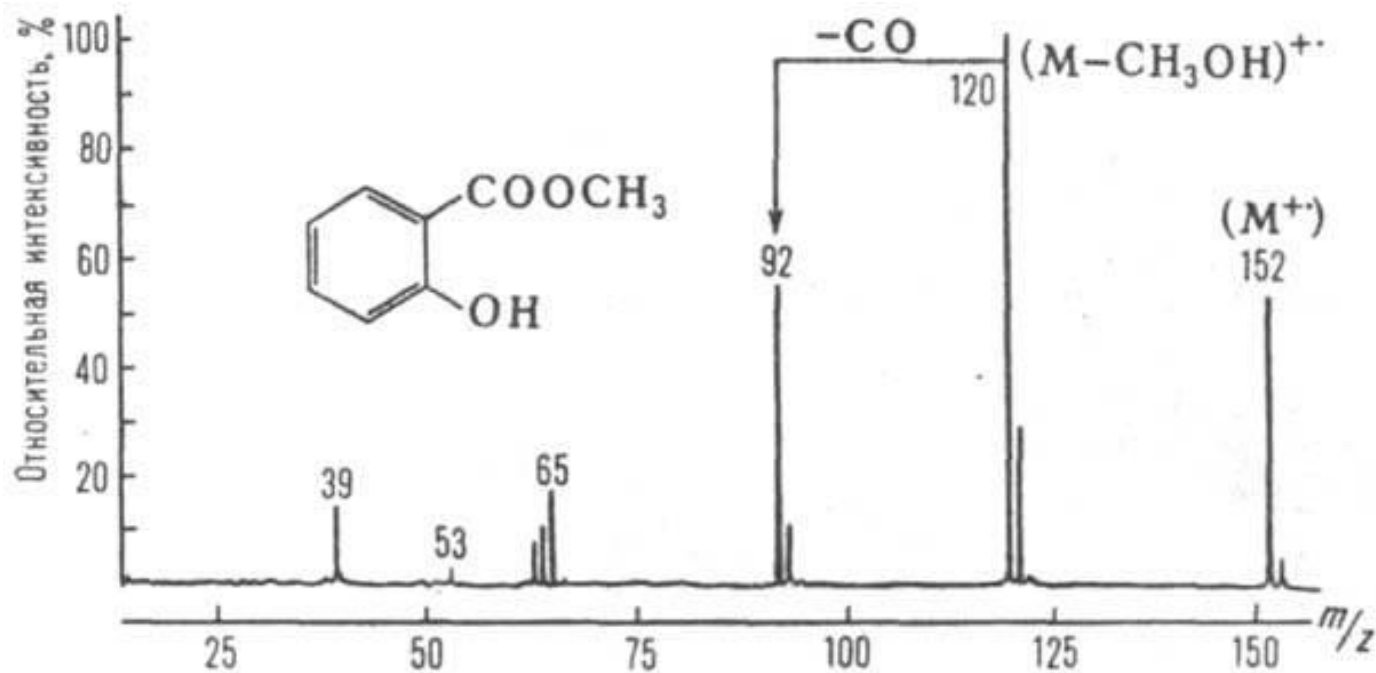
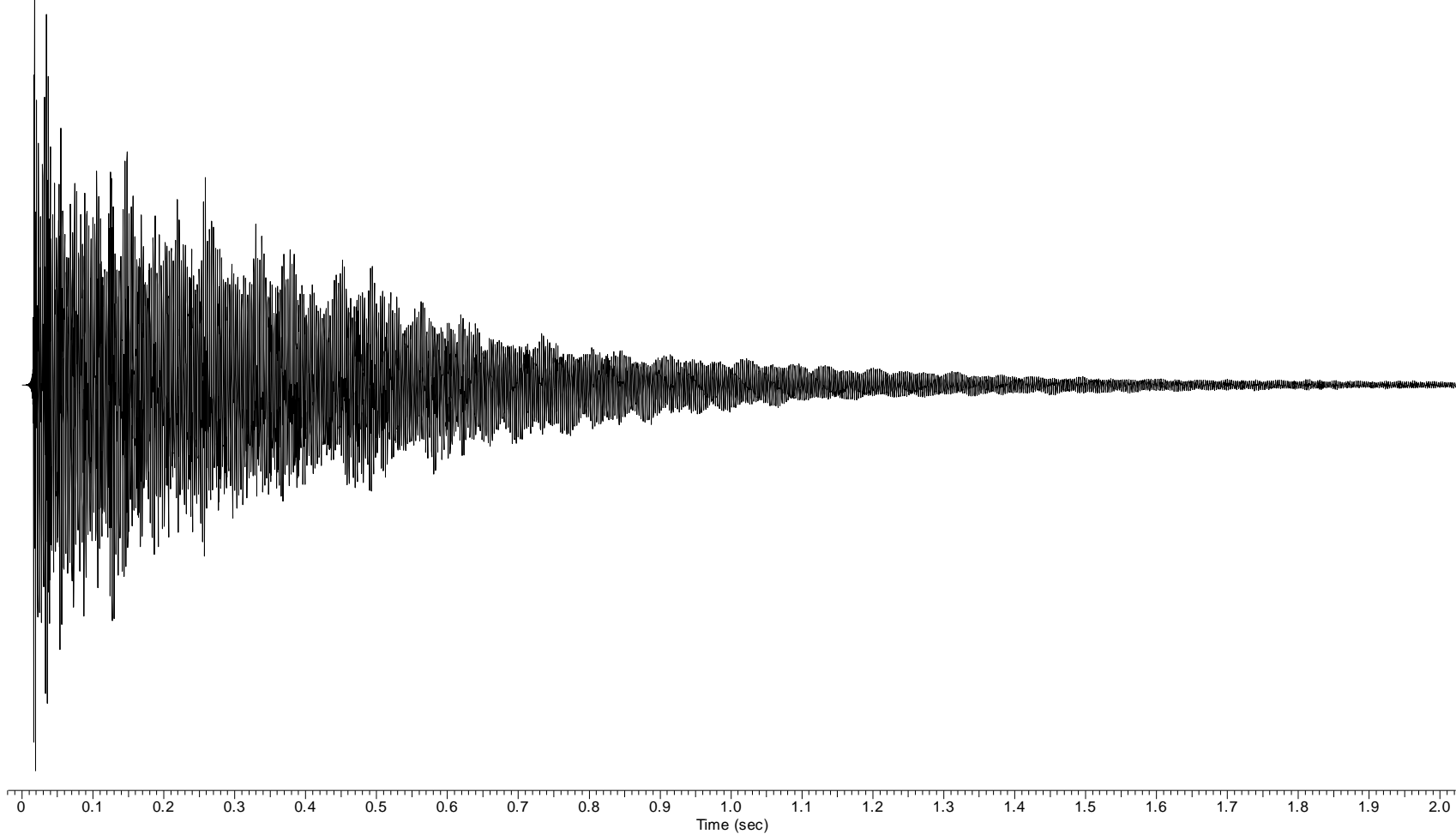


Рис. 1. Масс-спектр метилсалицилата.

ЯМР

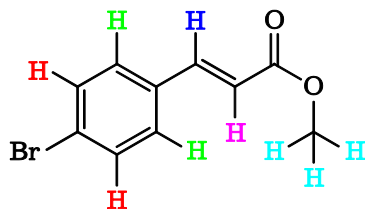
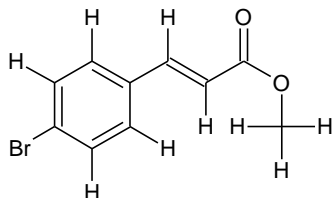
E146P1 - 4-BrPhCH=CHCOOMe.001.esp



ЯMP

Acquisition Time (sec)	7.4449	Date	25 Aug 2010 12:44:48	Date Stamp	25 Aug 2010 12:44:48
File Name	D:\Data\Spectra\E146P1 - 4-BrPhCH=CHCOOMe\1pdata\11r			Frequency (MHz)	400.13
Number of Transients	10	Origin	spect	Original Points Count	32768
Pulse Sequence	zg	Receiver Gain	32.00	SW(cyclical) (Hz)	4401.41
Spectrum Offset (Hz)	1871.2306	Spectrum Type	STANDARD	Sweep Width (Hz)	4401.34
				Solvent	CHLOROFORM-d
				Temperature (degree C)	27.000

E146P1 - 4-BrPhCH=CHCOOMe.001.001.1r.esp



No.	(ppm)	Height
1	3.80	1.0000
2	6.40	0.1587
3	6.44	0.1703
4	7.25	0.1788
5	7.36	0.1554
6	7.38	0.2062
7	7.50	0.2147
8	7.52	0.1521
9	7.59	0.0977
10	7.63	0.0912

