

# ЯМР-СПЕКТРОСКОПІЯ ЯК МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ БУДОВИ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК

Стрижак Д.О.

Полтавський національний педагогічний університет імені В.Г. Короленка

У сучасній науці все більше набуває використання фізичний метод дослідження спектрів ядерно-магнітних резонансів. Широкого використання ЯМР-спектроскопія набула у вивченні будови органічних речовин, особливо використовується для перевірки будови та чистоти синтезованих речовин.

В основі методу лежить дослідження магнітних властивостей ядра атома, так як деякі атоми та їх протони мають кутовий момент  $P$ , що обумовлює утворення магнітного моменту ядра  $\mu$ . (3, 17) Кожен тип ядра має типову для нього резонансну частоту. Водночас значення резонансної частоти певного ядра прямо залежить від молекулярної структури сполуки.

Для пояснення цього явища наведемо приклад ЯМР-спектру бензилацетату. На рис.1 ми можемо спостерігати три сигнали, що мають різне розташування. Ці сигнали отримані від протонів фенольного ядра, метиленової та метильної груп. Таке розташування обумовлене різним оточенням груп протонів у молекулі сполуки. Це явище носить назву хімічного зсуву.

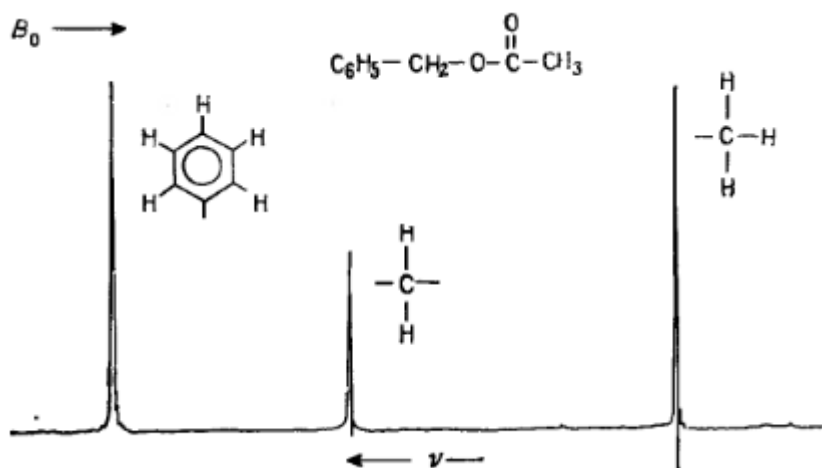


Рис. 1 ЯМР-спектр бензилацетата (3, 29-30)

Для отримання якісного спектру важливу роль відіграють приготування зразку для дослідження. Для цього використовують ампулу із зовнішнім діаметром 5 мм, куди поміщують 20-30 мг досліджуваної речовини та розчиняють її у 0,5 мл розчинника. Загальний об'єм у готовій пробі не повинен перевищувати 4 см висоти ампули, не містити нерозчинних часток досліджуваної речовини та бульбашок повітря. Наразі широкого використання у ролі розчинників набули дейтеровані розчинники, які мають ряд вимог. Основні з них це чистота розчинників від домішок, перш за все води; сигнали залишкових протонів розчинника не повинні накладатися на сигнали речовини, що несуть основну інформацію, а також важливо враховувати можливість розчинника вступати в хімічний обмін з протонами таких функціональних груп як: -ОН, -NH, -NH<sub>2</sub>, що можуть міститись у досліджуваній речовині та здатність розчинника утворювати водневі зв'язки з протонами речовини. Останнє явище призводить до «утягування» сигналів на спектрі. (1, 4, 5)

Для зняття ЯМР-спектрів під час нашого дослідження дифторметоксиазинів та їх похідних як розчинники були використанні DMSO (диметилсульфоксид) та CDCl<sub>3</sub> (дейтерований хлороформ).

Так як досліджувані речовини належать до ряду піридинових сполук, то за дослідженням літературних даних та отриманих практичних результатів було виявлено, що для протонів піридинового циклу спостерігається істотне зміщення сигналу слабе поле (8.48-8.68 м.д.), пояснюється це явище електроноакцепторним впливом гетероатому (N). (1, 6)

Водночас, маючи у сполуках атоми Флуору та спираючись на дані електронегативності замісників, можна частково передбачити області знаходження відповідного сигналу в спектрі. У літературних джерелах використаних під час дослідження теми ґрунтовно описано приклади кореляції між хімічним зсувом протона та електронегативністю замісника. Крім того, варто звернути увагу, що магнітна анізотропія зв'язку C-Ha1 додатково зменшує екранування протонів, порівняно з аналогічною електронегативністю негалогенів (наприклад, халькогенами). (2, 4, 5)

Таким чином ми бачимо широкі можливості використання спектрів ядерного магнітного резонансу у практиці дослідження будови органічних сполук та їх заміщених похідних. Окрім цього глобальна база вже наявних літературних даних дозволяє нам робити певні припущення, щодо положення функціональних груп та замісників у молекулі, і дає розуміння побудови спектру до отримання результату дослідження проби.

### **Список використаної літератури**

1. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопия органических веществ: Пер. с англ. – М. : Мир. – 1991. – 300 с.
2. Воловенко Ю.М., Туров О.В. Ядерный магнитный резонанс: Підруч. для студ. вищ. навч. закл. – К. : Ірпінь. ВТФ «Перун». – 2007. – 480 с.
3. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР: Пер. с англ. – М. : Мир. – 1984. – 478 с.
4. Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение УФ-, ИК- и ЯМР-спектроскопии в органической химии. Учеб. пособие для вузов. – М. : Высшая школа. – 1991. – 264 с. 5.
5. Мельничук Д.О. М 48 Аналітичні методи досліджень. Спектроскопічні методи аналізу: теоретичні основи і методики: навчальний посібник для підготовки студентів вищих навчальних закладів / Д.О. Мельничук, С.Д. Мельничук, В.М. Войціцький та ін.: за ред. акад. Д.О. Мельничука. – К.: ЦП «Компринт». – 2016. – 289 с.
6. Преч Э., Бюльманн Ф., Афвольтер К. Определение строения органических соединений. – М. : Мир. – 2006. – 439 с.

## **ХІМІКО-АНАЛІТИЧНИЙ КОНТРОЛЬ ҐРУНТІВ**

**Стрижак С.В.**

Полтавський національний педагогічний університет імені В.Г. Короленка

Стан ґрунтів впливає на якість поверхневих, підземних вод та склад атмосферного повітря. Саме ґрунти – середовище існування більшості живих організмів на поверхні суші, вони створюють сприятливе навколишнє середовище для людини, бо є основним джерелом виробництва сільськогосподарської продукції. Отже, першорядною умовою збереження біосфери є хіміко-аналітичний контроль за станом ґрунтів, їх структурою і властивостями, а також обов'язкове здійснення системи охорони ґрунтів та заходів з підвищення родючості [1, 2].

Унаслідок неефективного використання об'єктів навколишнього середовища спостерігається різке зростання темпів деградації ґрунтів, про що наголошується у Національній доповіді про стан навколишнього природного середовища в Україні у 2010 рр. та Національній доповіді про стан родючості ґрунтів [1, 2].

Хіміко-аналітичний контроль ґрунтів – це комплекс спостережень за станом земельного фонду з метою своєчасного виявлення змін, їх оцінки, запобігання й усунення наслідків негативних процесів.

Хіміко-аналітичний контроль ґрунтів поєднує багато методів, які ґрунтуються на вимірі різних фізико-хімічних властивостей сполук або простих речовин з використанням відповідних приладів. До таких властивостей відносяться: густина, поверхневий натяг, в'язкість, помутніння, поглинання рентгенівських променів, ультрафіолетового, видимого, інфрачервоного випромінювань та мікрохвиль, випромінювання в результаті збудження, розсіювання світла, показник заломлення, тощо.