

Современные технологии в профессиональной сфере, в том числе цифровые



Модуль 2

Что может современный лабораторный химический анализ?

- **В неорганическом анализе** – одновременное определение в одном образце до 30 - 40 элементов при очень низких концентрациях (Атомно-эмиссионная спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-АЭС), Масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-МС), Рентгенофлуоресцентный анализ (РФС) и др.).
- **В органическом анализе** – одновременное определение десятков и даже сотен органических соединений и биологически активных веществ в их смесях при низких концентрациях (ГХ-МС, ЖХ-МС, ИФА и др.).

Тенденция развития методов химического анализа такова, что масс-спектрометрия становится основным методом современной аналитической химии, а также основным детектором в хроматографии.



Модуль 2

Основные достижения в области химического анализа

Определение чрезвычайно низких концентраций и очень малых количеств:

- Определение золота в горных породах нейтронноактивационным методом до 10^{-10} % масс.
- Определение полихлорированных диоксинов методом ГХ-МС высокого разрешения.
- Спектроскопическое обнаружение молекул органических соединений в межпланетном пространстве.
- Масс-спектрометрическое определение летучих органических веществ в выдыхаемом воздухе.
- Определение металлов, загрязняющих почву в полевых условиях.
- Обнаружение и определение форм существования компонентов в объекте анализа. Определение формы существования токсичных элементов в объектах окружающей среды: хром (VI) и хром (III); мышьяк (V) и мышьяк (III), разные формы ртути. Определение оптических изомеров (лекарства и др.).
- Анализ без разрушения образца. Объектами такого анализа могут стать произведения скульптуры, живописи, прикладного искусства, вещественные доказательства, взрывчатые вещества в багаже. Применяют методы радиоактивационного анализа рентгенофлуоресцентного анализа, ядерный квадрупольный резонанс.
- Анализ на расстоянии. Анализ космических объектов, анализ на океанских глубинах «земные» дистанционные анализы (воздух вдоль улиц или над заводами, контроль состава смесей в химических реакторах, контроль радиоактивности).

Модуль 2

Взаимосвязь спектроскопических методов и областей электромагнитного спектра

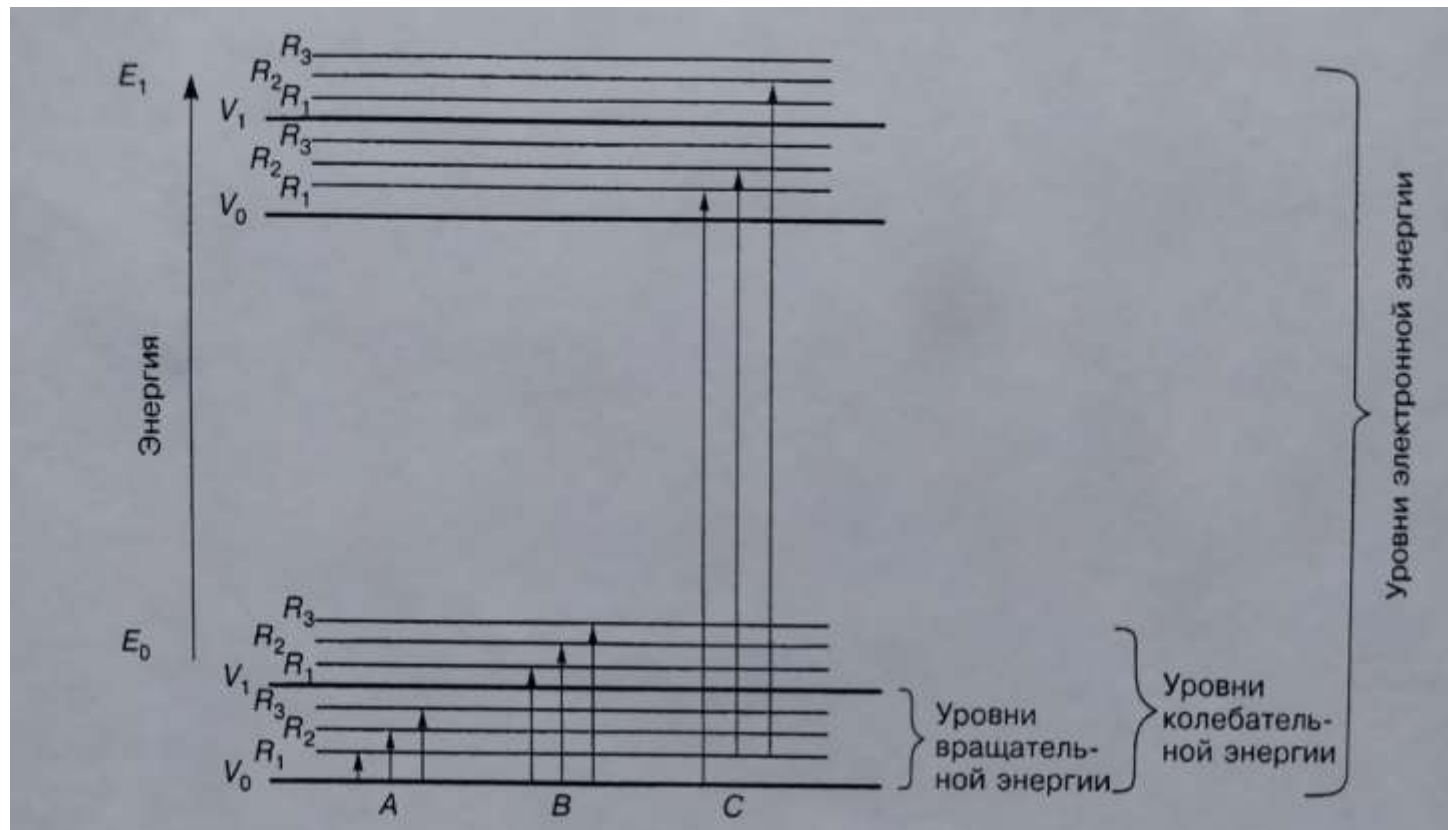
Спектроскопические методы	Спектральная область	Изменяют свою энергию
ядерно-физические	0,005-1,4 Å	ядра
рентгеновские	0,1-100 Å	внутренние электроны
вакуумная УФ-спектроскопия	10-180 нм	валентные электроны
УФ-спектроскопия	180-400 нм	валентные электроны
спектроскопия в видимой области	400-780 нм	валентные электроны
ближняя инфракрасная спектроскопия	780-2500 нм	молекулы (колебательная энергия)
инфракрасная спектроскопия	4000-400 см ⁻¹	молекулы (колебательная, вращательная энергия)
микроволновая спектроскопия	0,75- 3,75 см ⁻¹	молекулы (вращательная энергия)
электронный парамагнитный резонанс	~3 см	неспаренные электроны (в магнитном поле)
ядерный магнитный резонанс	0,6-10 м	ядерные спины (в магнитном поле)

$c = v\lambda$ (волновая природа света)

$E = h \cdot \nu$ (корпускулярная природа света)

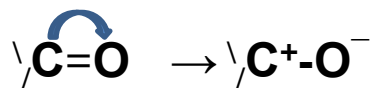
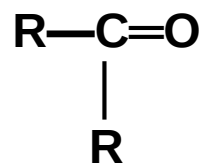
Модуль 2

Энергетические уровни

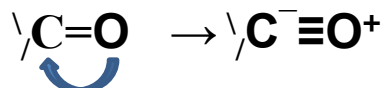


Модуль 2

Электронные переходы



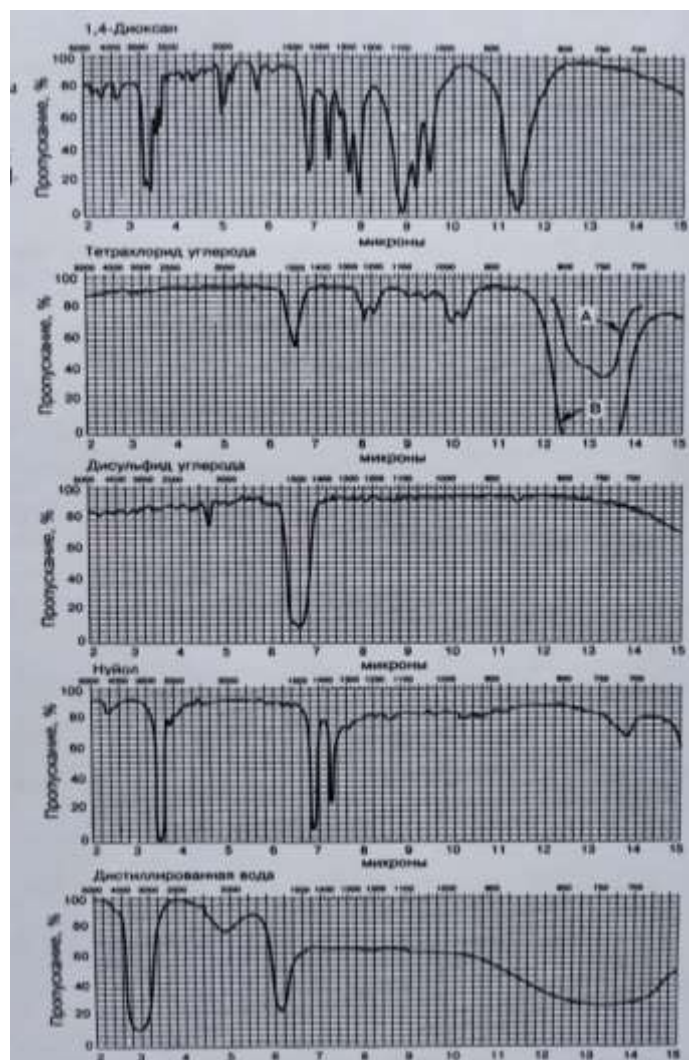
$\pi \rightarrow \pi^*$ - переход



$n \rightarrow \pi^*$ -переход

Модуль 2

ИК-спектроскопия



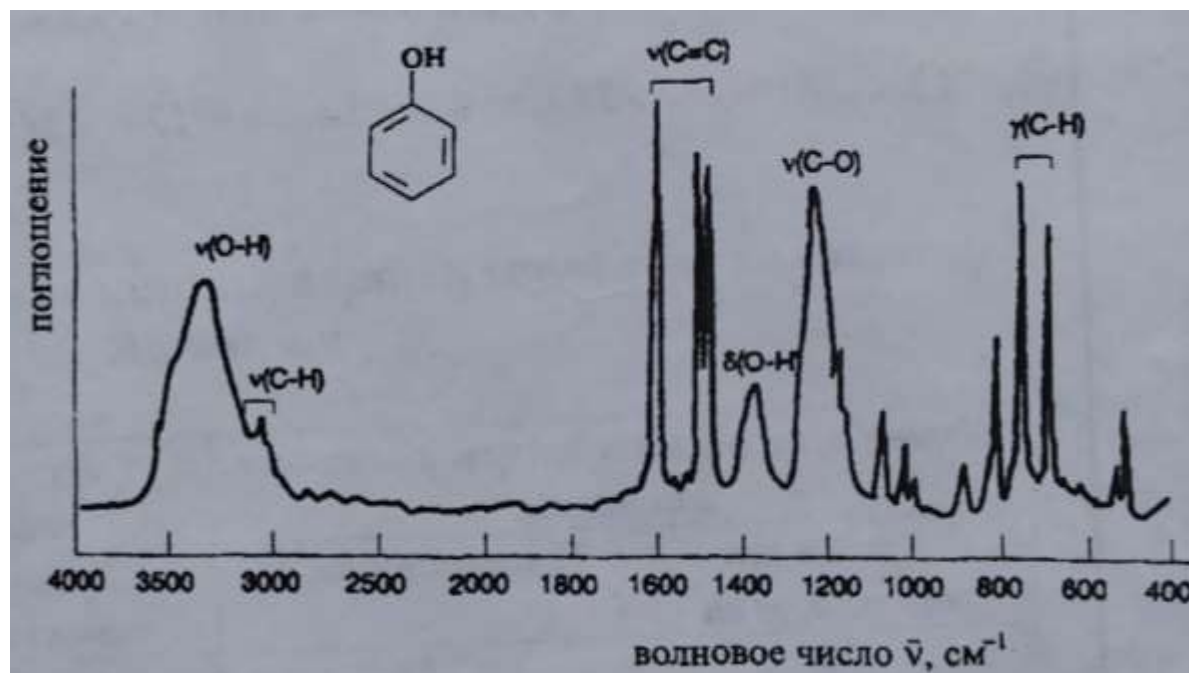
Модуль 2

Основные классы органических соединений и область их обнаружения

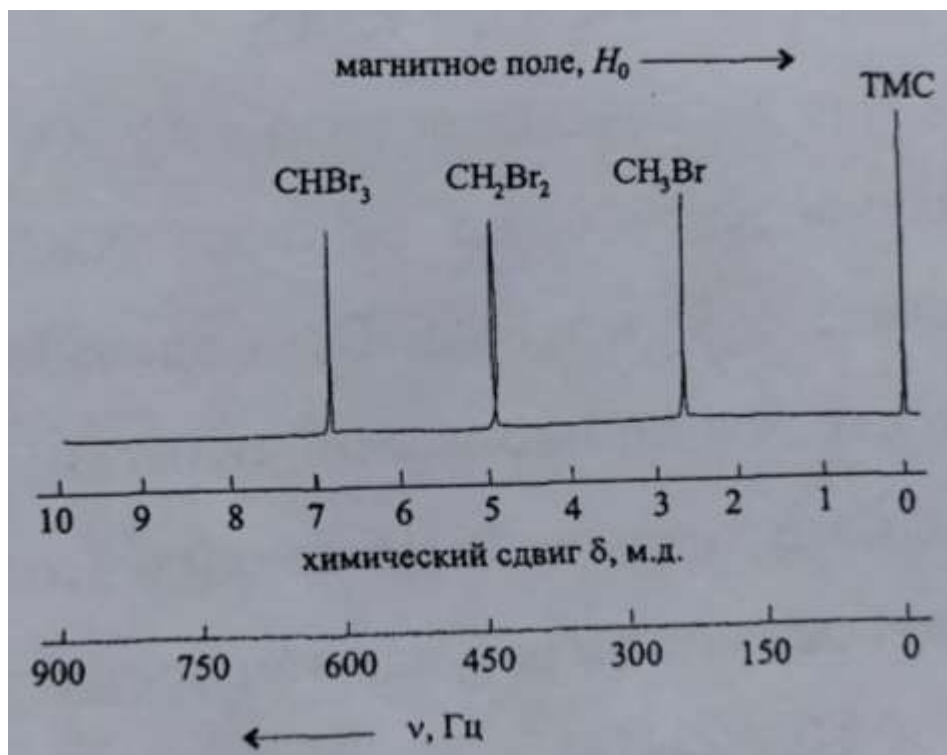
Колебания	Класс вещества	ν , см^{-1}
C-H-, валентные	алифатические	2800-3000
C-H-, валентные	ненасыщенные	3000-3100
C=C-, валентные	алкены	1630-1680
C=C-, валентные	ароматические	1500-1600
C $\equiv$ C-, валентные	алкины	2100-2260
C-H-, веерные	алкены, ароматические	700-1000

Модуль 2

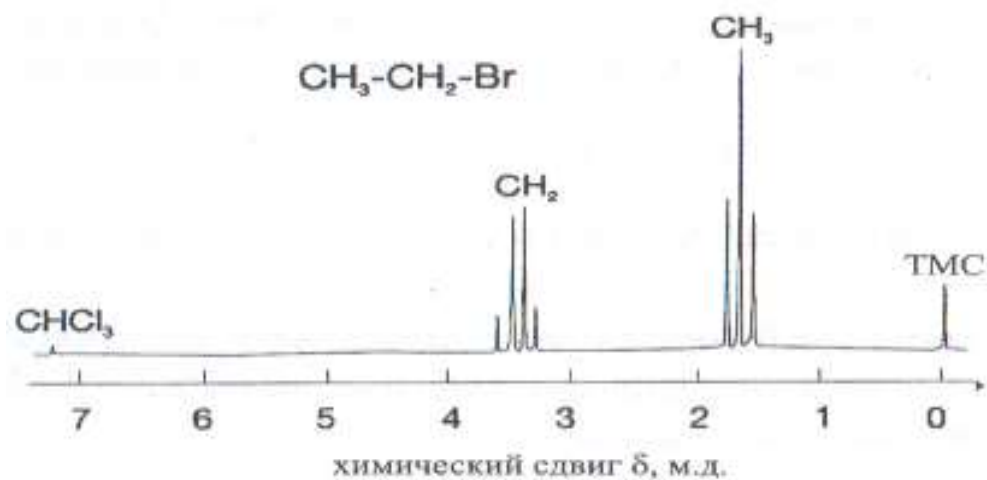
ИК-спектроскопия



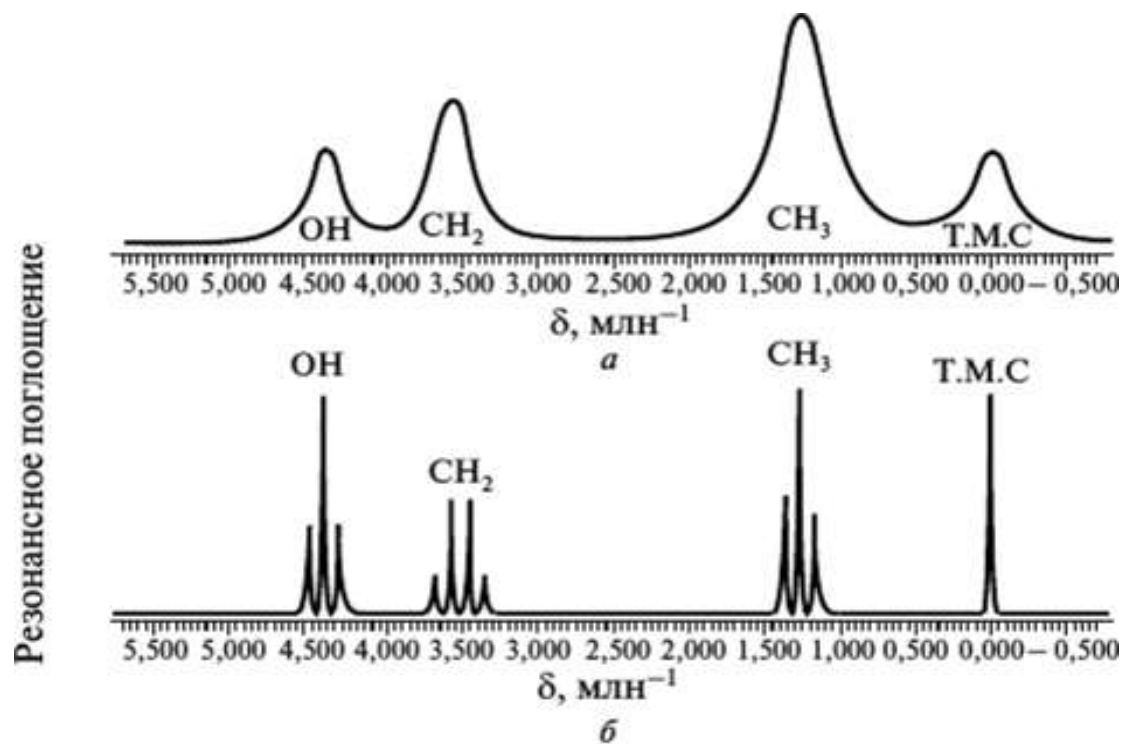
Модуль 2 ЯМР



Модуль 2 ЯМР

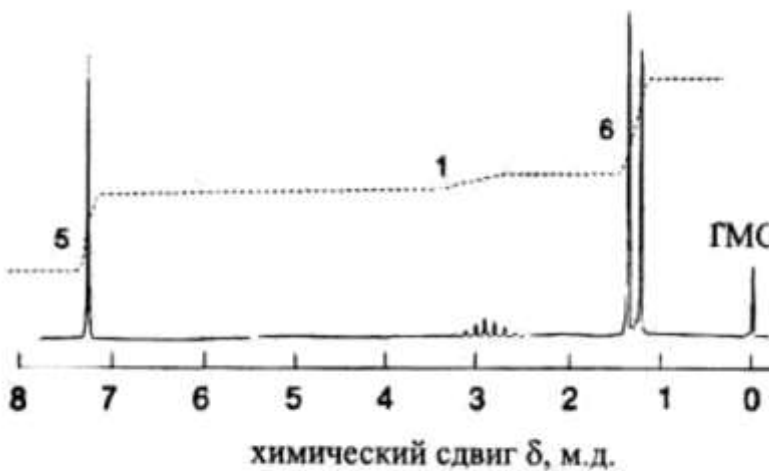
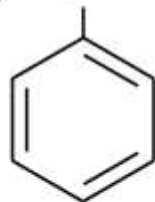


Модуль 2 ЯМР



Модуль 2 ЯМР

ЯМР-спектр изопропилбензола (кумола)



31

Модуль 2 ЯМР

Определение концентрации методом внутреннего стандарта

$$m_x = m_{ст} \frac{N_{ст}}{N_x} \cdot \frac{M_x}{M_{ст}} \cdot \frac{A_x}{A_{ст}},$$

где m – масса вещества, N – число протонов в группе,
для которой измерен сигнал, A – площадь пика, M –
молярная масса вещества, а индексы x и $ст$
обозначают определяемое вещество и внутренний
стандарт.

Модуль 2

Гель-хроматография

