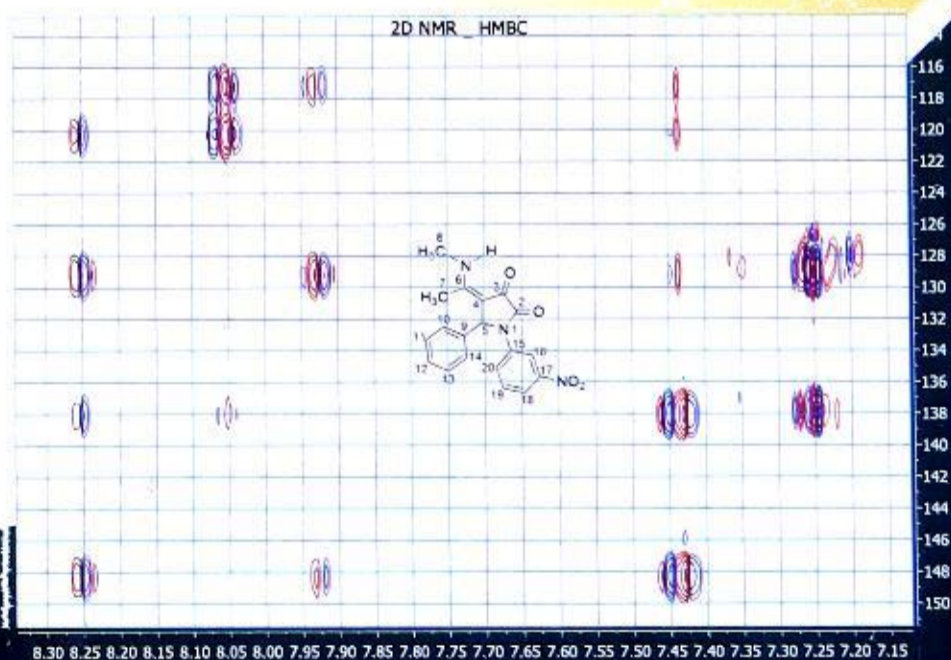




ĐẠI HỌC ĐÀ NẴNG
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

NGUYỄN TRẦN NGUYỄN

GIÁO TRÌNH
**CẤU TRÚC
& PHỔ**



NHÀ XUẤT BẢN ĐÀ NẴNG

ĐẠI HỌC ĐÀ NẴNG
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

Nguyễn Trần Nguyên



Giáo trình
CẤU TRÚC VÀ PHỔ



NHÀ XUẤT BẢN ĐÀ NẴNG

Lời nói đầu

Ngày nay, những thành tựu khoa học kỹ thuật thuộc lĩnh vực phổ và quang phổ đã tạo nền tảng vững chắc cho những phát triển trong các ngành công nghiệp hóa học, công nghiệp hóa dược, dược phẩm, khoa học vật liệu và những ngành có liên quan thuộc lĩnh vực y sinh. Các nhà hóa học có khả năng tìm ra phương pháp tổng hợp nên chất mới từ các hóa chất cơ bản có trên thị trường, phân lập được các chất hữu cơ có ích cho đời sống con người từ nguyên liệu có nguồn gốc thiên nhiên. Dựa vào những kiến thức được đào tạo về phổ và quang phổ, các nhà hóa học có thể xác định cấu trúc của các hợp chất là sản phẩm của tổng hợp hữu cơ hoặc được chiết xuất từ thiên nhiên một cách dễ dàng.

“Cấu trúc và phổ” là môn học bắt buộc đối với sinh viên ngành Cử nhân Hóa học. Vì vậy, giáo trình này được biên soạn nhằm cung cấp cho sinh viên tài liệu học tập chính thức của môn học tại Trường Đại học Sư phạm, Đại học Đà Nẵng.

Nội dung chính của giáo trình bao gồm các kiến thức về quang phổ, phổ hồng ngoại, phổ tử ngoại - khả kiến (UV-VIS), phổ khối lượng và phổ cộng hưởng từ hạt nhân. Ngoài nội dung lí thuyết được trình bày ngắn gọn, cuối mỗi chương còn có phần tóm tắt nội dung chính và hệ thống các bài tập từ dễ đến khó nhằm giúp sinh viên vận dụng các kiến thức đã học trong việc giải quyết các vấn đề cụ thể.

Trong quá trình biên soạn giáo trình này, tác giả xin gởi lời cảm ơn chân thành đến các đồng nghiệp và quý thầy cô đã giành thời gian đọc và có những ý kiến đóng góp quý báu. Mặc dù đã hết sức cố gắng nhưng chắc chắn rằng nội dung giáo trình còn có nhiều thiếu sót, tác giả mong nhận được nhiều ý kiến đóng góp từ quý thầy cô và các bạn sinh viên.

Đà Nẵng, tháng 04 năm 2023

Tác giả

Nguyễn Trần Nguyên

MỤC LỤC

Chương 1. ĐẠI CƯƠNG VỀ QUANG PHỔ.....	7
1.1. Bức xạ điện từ và các đặc trưng của bức xạ điện từ	7
1.2. Quang phổ	8
1.3. Định luật Lambert - Beer	10
1.4. Các vùng phổ quang học	11
Chương 2. PHỔ HỒNG NGOẠI.....	12
2.1. Sự hấp thụ bức xạ hồng ngoại	12
2.2. Dao động hóa trị và dao động biến dạng của liên kết	14
2.3. Cơ sở lí thuyết của dao động phân tử.....	14
2.4. Các yếu tố ảnh hưởng đến tần số và số sóng của dao động hóa trị của liên kết	18
2.5. Phổ kế hồng ngoại biến đổi Fourier - FTIR	20
2.6. Một số đặc điểm của phổ hồng ngoại.....	21
2.7. Phân tích phổ hồng ngoại của một số hợp chất hữu cơ.....	23
CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP CHƯƠNG 2.....	44
Chương 3. PHỔ UV - VIS.....	50
3.1. Sự kích thích electron và các bước chuyển electron	50
3.2. Nguyên lí Franck - Condon.....	52
3.3. Các nhóm mang màu.....	55
3.4. Ảnh hưởng của sự liên hợp	58
3.5. Phổ tử ngoại khả kiến của hợp chất thơm	61
3.6. Ảnh hưởng của các nhóm thế đến phổ tử ngoại của hợp chất thơm	63
3.7. Màu của các hợp chất.....	65
CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP CHƯƠNG 3.....	68

Chương 4. PHỔ KHỐI	70
4.1. Mở đầu	70
4.2. Tổng quan về phổ khối lượng	70
4.3. Các phương pháp ion hóa	71
4.4. Bộ phận phân tích khối lượng.....	81
4.5. Phân loại peak trên phổ khối.....	88
4.6. Một số quy tắc và kiểu phân mảnh trong phổ khối.....	96
4.7. Phổ khối của một số hợp chất hữu cơ.....	98
CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP CHƯƠNG 4	127
Chương 5. PHỔ CỘNG HƯỞNG TỪ HẠT NHÂN	136
5.1. Tính chất từ của hạt nhân nguyên tử.....	137
5.2. Số lượng tử spin của hạt nhân nguyên tử.....	137
5.3. Mối quan hệ giữa momen từ và momen động lượng.....	138
5.4. Năng lượng của hạt nhân trong từ trường ngoài.....	139
5.5. Hiện tượng cộng hưởng và điều kiện cộng hưởng.....	143
5.6. Độ chuyển dịch hóa học.....	145
5.7. Tương tác spin - spin trong phổ ^1H NMR.....	159
5.8. Phổ ^{13}C NMR.....	170
5.9. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân hai chiều (2D NMR).....	176
CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP CHƯƠNG 5	184
BÀI TẬP TỔNG HỢP	192