

ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
NGUYỄN ĐÌNH TRIỆU

BÀI TẬP VÀ THỰC TẬP CÁC PHƯƠNG PHÁP PHỔ



MỤC LỤC

PHẦN I. CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP	
1.1 Phổ hồng ngoại	5
1.2 Phổ tử ngoại	5
1.3 Phổ cộng hưởng từ hạt nhân	21
1.4 Phổ khối lượng	29
1.5 Kết hợp các phương pháp phổ	73
PHẦN II. BÀI GIẢI VÀ TRẢ LỜI	
2.1 Phổ hồng ngoại	94
2.2 Phổ tử ngoại	146
2.3 Phổ cộng hưởng từ hạt nhân	146
2.4 Phổ khối lượng	151
2.5 Kết hợp các phương pháp phổ	153
PHẦN III. THỰC TẬP	
3.1 Đo phổ tử ngoại và khả kiến (UV/VIS)	166
3.1.1 Phổ kế và vận hành	170
3.1.2 Cuvet	170
3.1.3 Kiểm tra máy	177
3.1.4 Phân tích định tính	177
3.1.5 Phân tích định lượng đơn chất	177
3.1.5.1 Nguyên tắc chung	177
3.1.5.2 Xác định axit benzoic	180
3.1.5.3 Xác định dung dịch Co^{+2}	180
3.1.5.4 Xác định định lượng hai chất trong dung dịch	180
3.2 Đo phổ hồng ngoại (IR)	181
3.2.1 Phổ kế hồng ngoại	181
3.2.2 Cửa sổ cuvet	182
3.2.3 Kỹ thuật đo mẫu dạng khí và hơi	182
3.2.4 Kỹ thuật đo mẫu màng bột, màng nhão và màng mỏng	183
3.2.4.1 Phương pháp màng bột	183
3.2.4.2 Phương pháp màng nhão	184
3.2.4.3 Phương pháp màng mỏng	184
3.2.5 Kỹ thuật đo mẫu màng ép KBr	185
3.2.6 Kỹ thuật đo mẫu lỏng tinh khiết và dung dịch	185
3.2.7 Phân tích định lượng	186
3.2.7.1 Phân tích định lượng đơn chất	186
3.2.7.2 Phân tích định lượng hỗn hợp	187
3.2.7.3 Phân tích định lượng chất rắn theo phương pháp ép màng KBr	187
3.3 Phương pháp do phổ hồng ngoại phản xạ	188
3.3.1 Kỹ thuật đo phổ hồng ngoại toàn phần suy giảm ATR	188
3.3.2 Kỹ thuật đo phổ hồng ngoại phản xạ khuếch tán	206
3.3.3 Kỹ thuật đo phổ hồng ngoại phản xạ ngoài	206
3.4 Câu hỏi kiểm tra thực tập quang phổ phân tử	209

Phụ lục		214
Tóm tắt lí thuyết		215
Bảng P.1	Tần số đặc trưng của một số nhóm hữu cơ và vô cơ trong phổ hồng ngoại	223
Bảng P.2	Cực đại hấp thụ của một số nhóm mang màu trong phổ tử ngoại và khả kiến	226
Bảng P.3	Độ chuyển dịch hóa học phổ $^1\text{H-NMR}$	229
Bảng P.4	Hằng số tương tác spin-spin phổ $^1\text{H-NMR}$	231
Bảng P.5	Độ chuyển dịch hóa học phổ $^{13}\text{C-NMR}$	232
Bảng P.6	Bảng số khối một số mảng xuất hiện trong phổ khối lượng	234
Bảng P.7	Số khối và tỉ lệ phân bố ion đồng vị của một số ion phân tử trong phổ khối lượng (M%)	236
Bảng P.8	Bảng tính cực đại hấp thụ của polien (qui luật Woodward)	242
Bảng P.9	Bảng tính cực đại hấp thụ của các hợp chất cacbonyl không bão hòa	243
Bảng P.10	Bảng tính độ chuyển dịch hóa học của nhóm metylen -CH ₂ - phổ $^1\text{H-NMR}$	244
Bảng P.11	Bảng tính độ chuyển dịch hóa học của proton anken phổ $^1\text{H-NMR}$	245
Bảng P.12	Bảng tính độ chuyển dịch hóa học của proton thơm phổ $^1\text{H-NMR}$	246
Bảng P.13	Độ chuyển dịch hóa học của một số dung môi (ppm)	247
Bảng P.14	Bảng tính độ chuyển dịch hóa học cho ^{13}C của các ankan mạch thẳng hay mạch nhánh phổ $^{13}\text{C-NMR}$ (ppm)	248
Bảng P.15	Bảng gia số nhóm thế ^{13}C - cho ankan, xicloankan phổ $^{13}\text{C-NMR}$ (ppm)	249
Bảng P.16	Độ chuyển dịch hóa học ^{13}C của hợp chất bão hòa phổ $^{13}\text{C-NMR}$	250
Bảng P.17	Bảng tính ^{13}C của anken, phổ $^{13}\text{C-NMR}$ (ppm)	251
Bảng P.18	Bảng tính ^{13}C cho cacbon vòng benzen phổ $^{13}\text{C-NMR}$	252
Bảng P.19	Độ chuyển dịch hóa học ^{13}C của nhóm cacbonyl và nitrin phổ $^{13}\text{C-NMR}$ (ppm)	253
Bảng P.20	Độ chuyển dịch hóa học ^{13}C của một số dung môi phổ $^{13}\text{C-NMR}$ (ppm)	253
Bảng P.21	Bảng chuyển đổi chiều dài bước sóng ($\lambda \mu\text{m}$) sang số sóng ($\bar{\nu}, \text{cm}^{-1}$)	254
Tài liệu tham khảo		261