

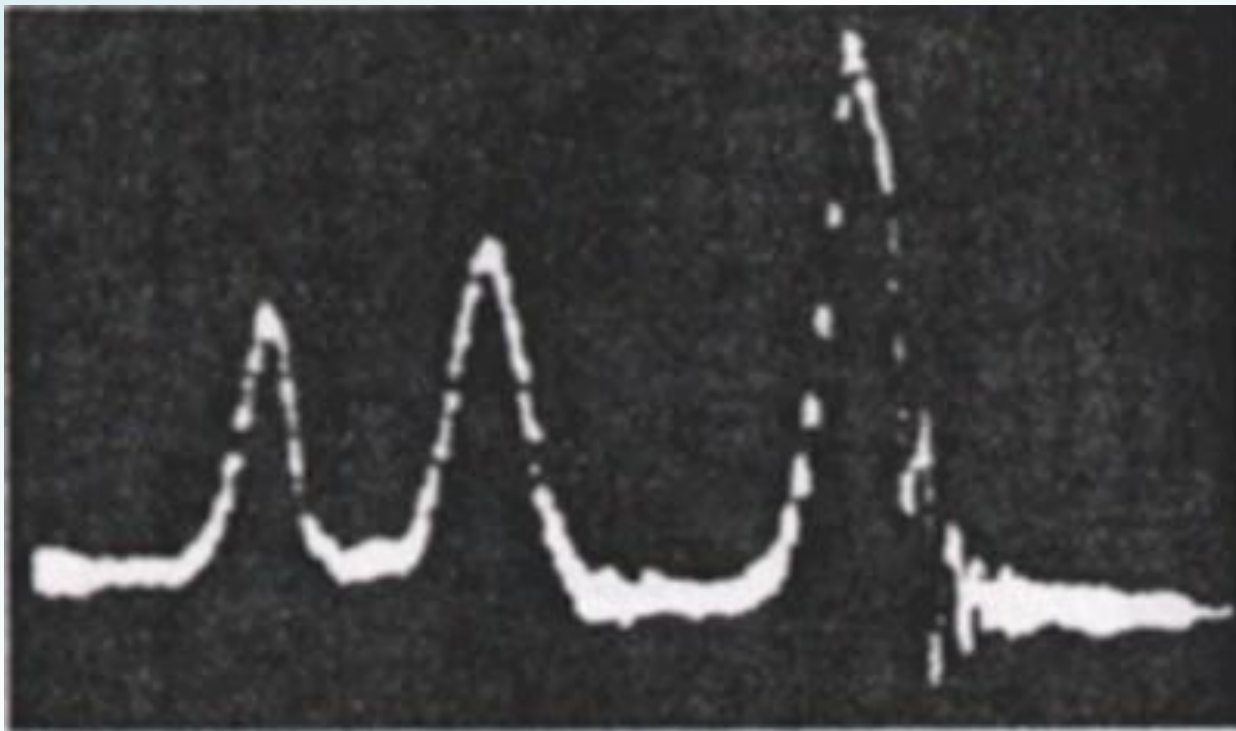


ХІМІЧНІ ЗСУВИ СИГНАЛІВ ЯМР



хімічний зсув сигналів

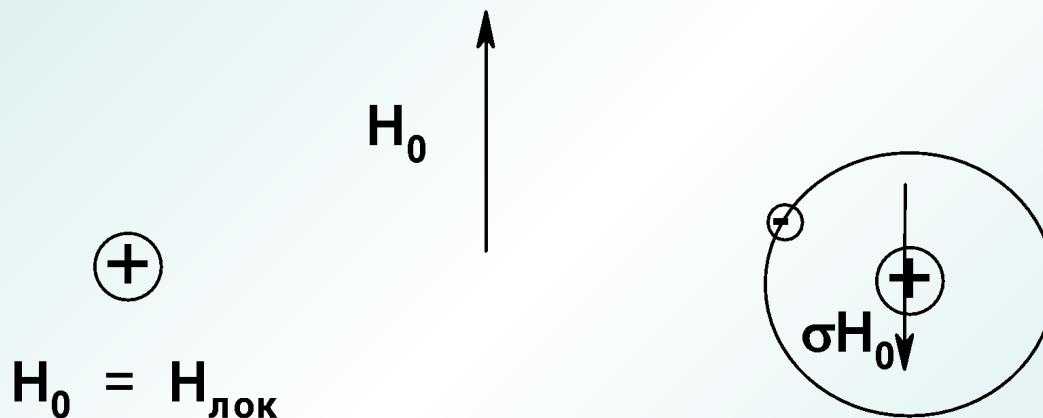
один з перших ^1H -ЯМР спектрів етанолу





хімічний зсув сигналів

-зміщення сигналів ЯМР, зумовлене екрануванням ядер електронними оболонками. σ – константа екранування



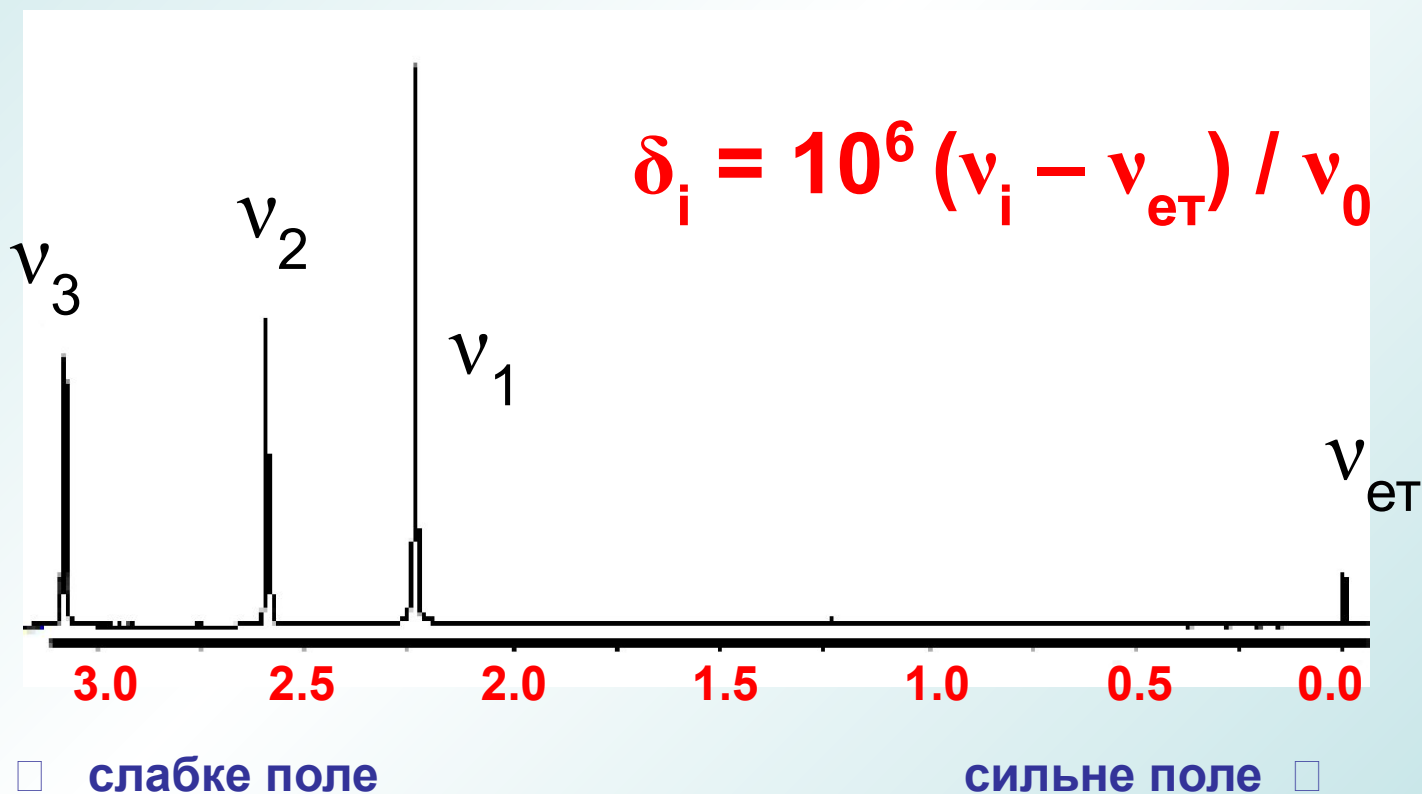
$$H_{\text{лок}} = H_0 - \sigma H_0 = H_0(1 - \sigma)$$

$$\nu_i = \gamma H_0(1 - \sigma)/2\pi$$



ХІМІЧНІ ЗСУВИ СИГНАЛІВ В СПЕКТРАХ ЯМР

-зміщення сигналів ЯМР, зумовлене екрануванням ядер електронними оболонками.





ЕТАЛОННІ РЕЧОВИНИ В СПЕКТРОСКОПІЇ ЯМР

Повинні мати чіткі сигнали ЯМР відповідних ядер, бажано одного типу

ЯМР сигнали еталону мають проявлятися в області частот, відмінній від типових областей поглинання сполук, що досліджуються

еталонні сполуки мають бути хімічно інертними

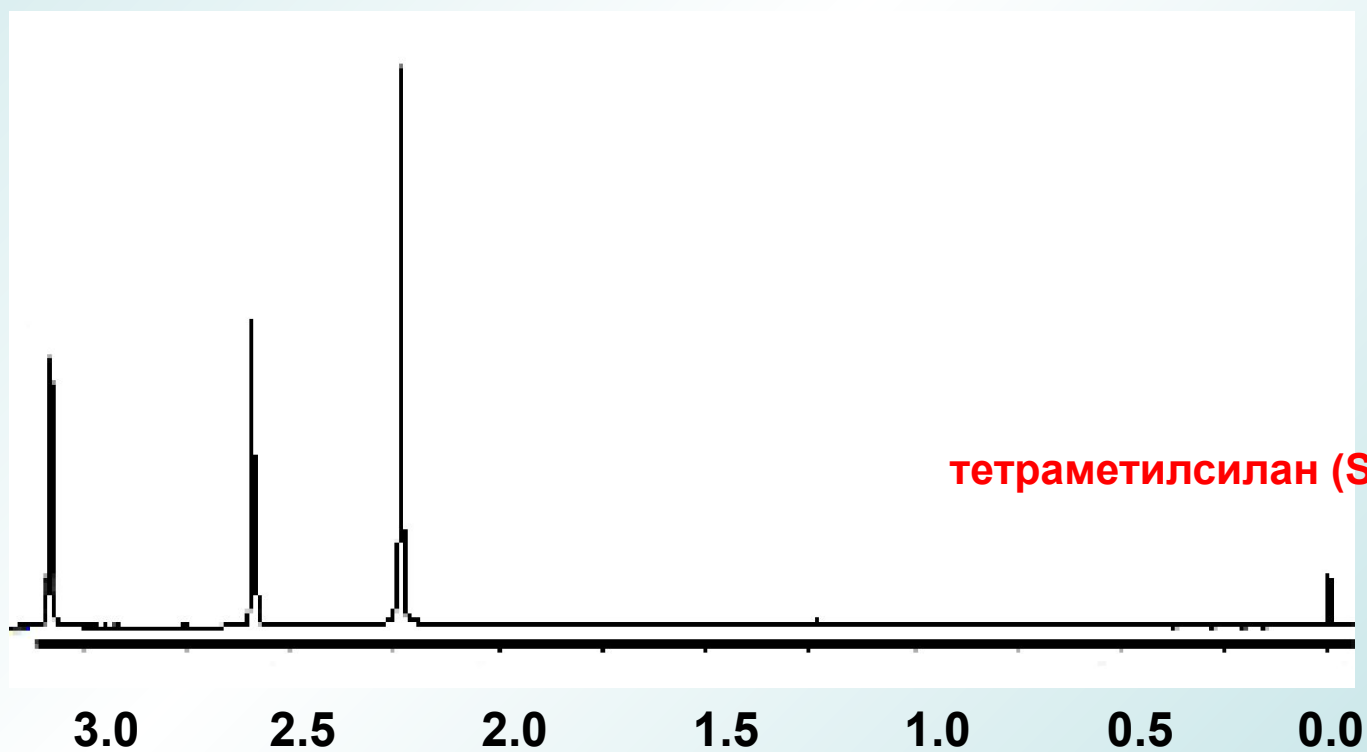
дешевими

нетоксичними

Приклад – для ядер ^1H , ^{13}C , ^{29}Si використовують тетраметилсилан $\text{Si}(\text{Me})_4$



ХІМІЧНІ ЗСУВИ СИГНАЛІВ В СПЕКТРАХ ЯМР

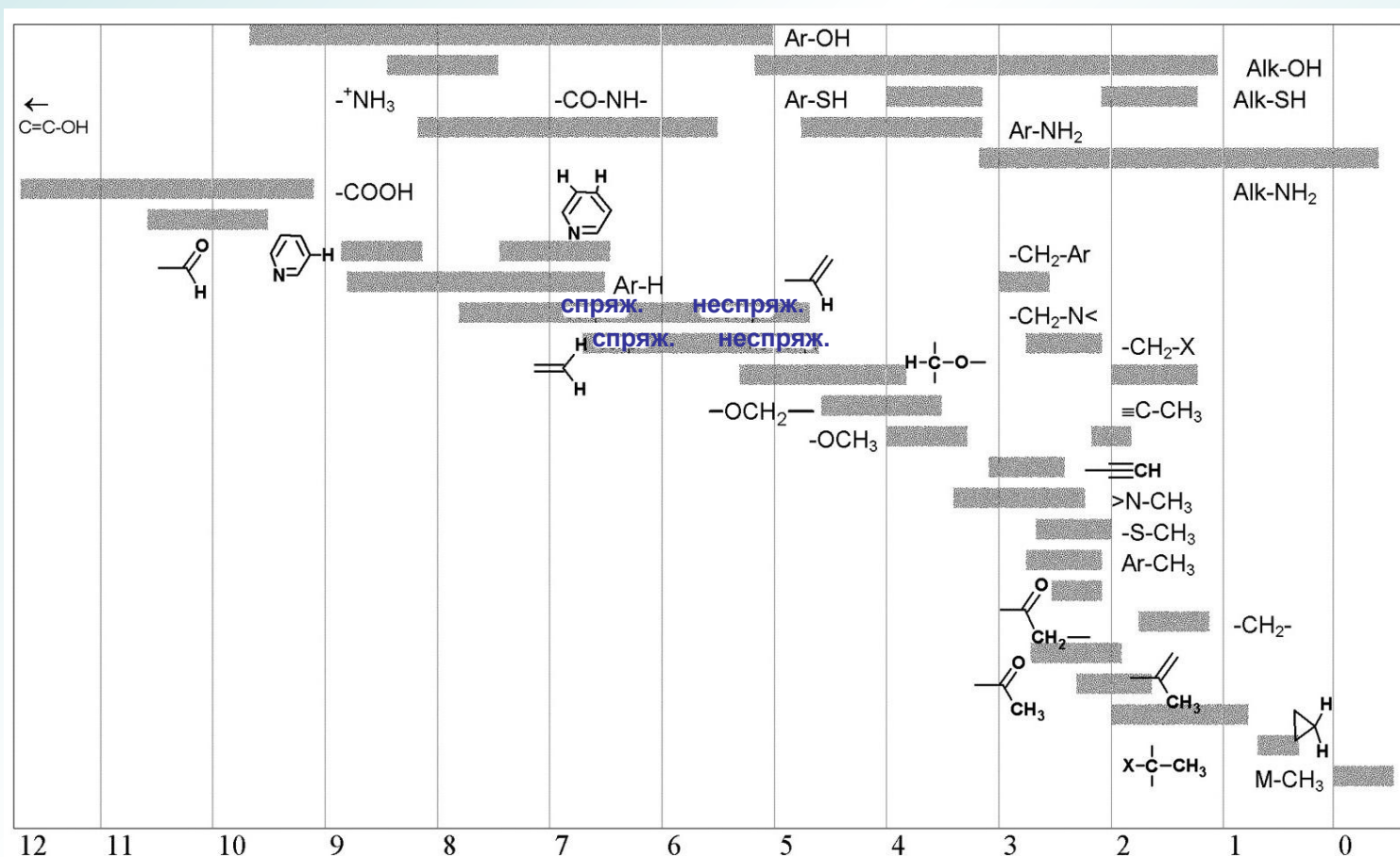




ХІМІЧНІ ЗСУВИ СИГНАЛІВ В СПЕКТРАХ ЯМР

хімічний зсув є **ХАРАКТЕРИСТИЧНИМ**:
величина зсуву залежить від того, в якому оточенні
знаходиться магнітне ядро

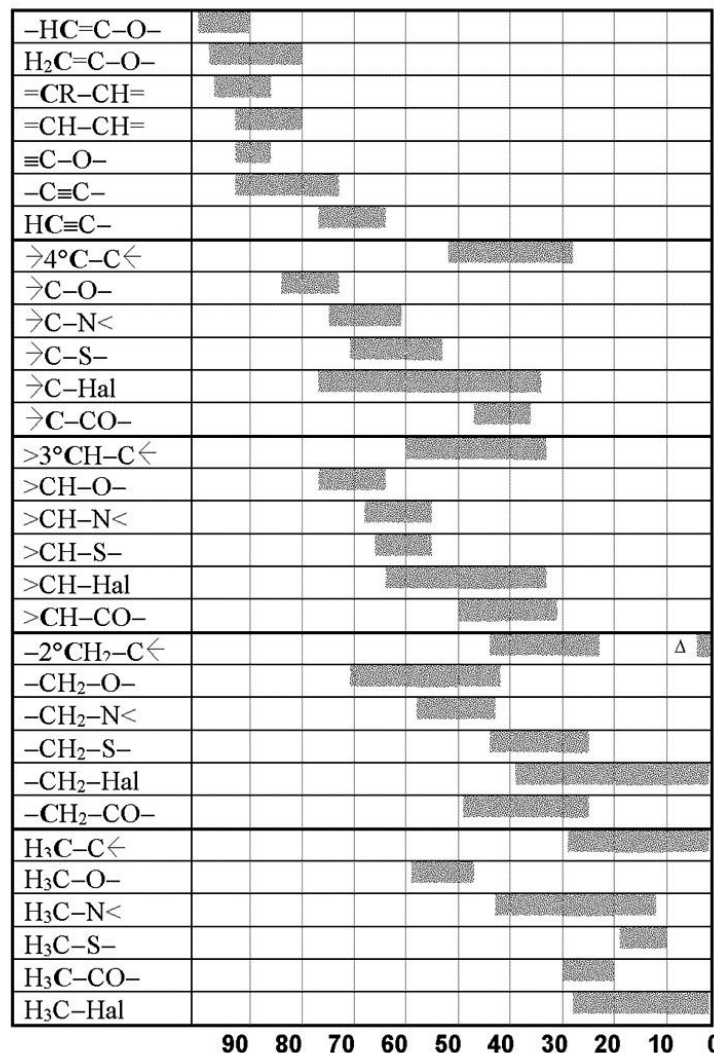
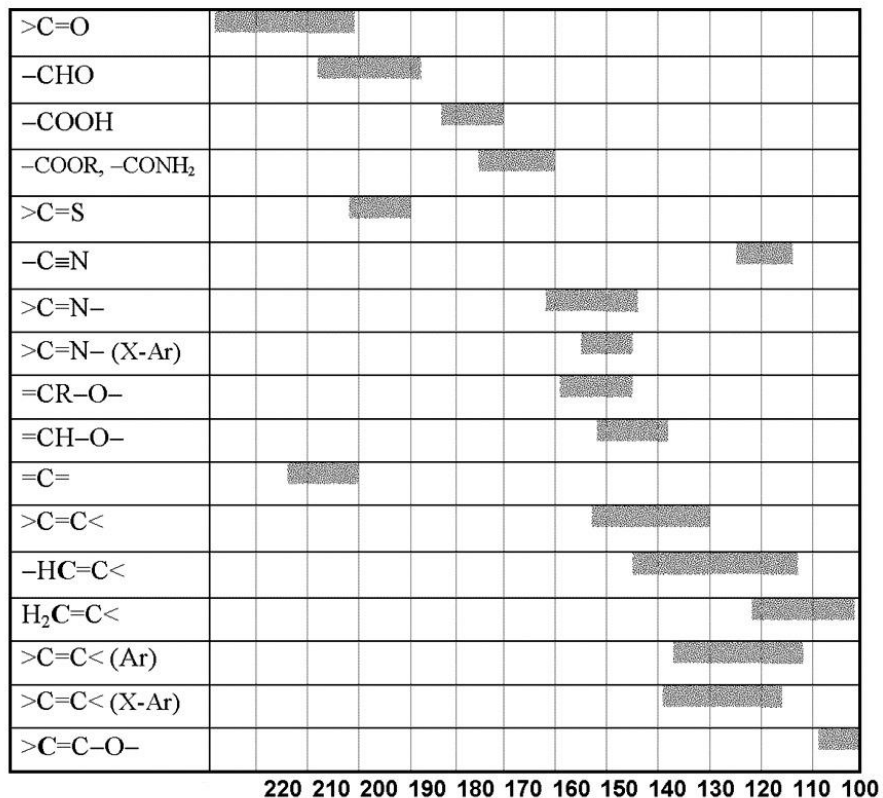
Приклад – ядро ^1H





ХІМІЧНІ ЗСУВИ СИГНАЛІВ В СПЕКТРАХ ЯМР

Інший приклад – ядро ^{13}C

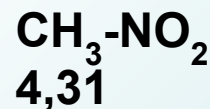
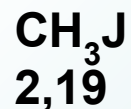
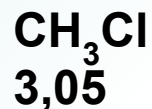
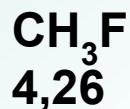




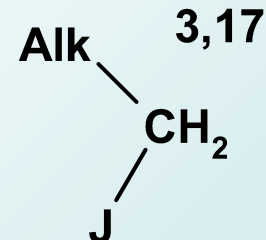
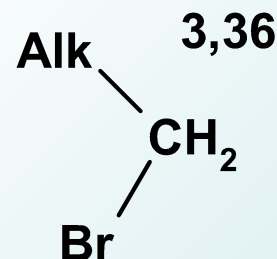
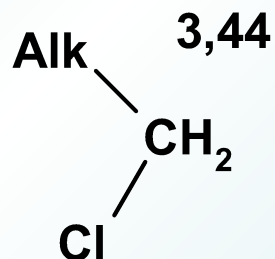
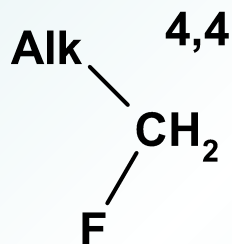
ВІД ЧОГО ЗАЛЕЖИТЬ ХІМІЧНИЙ ЗСУВ?

Електронні ефекти – екранування та дезекранування

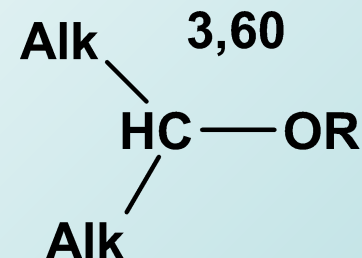
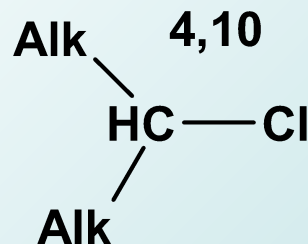
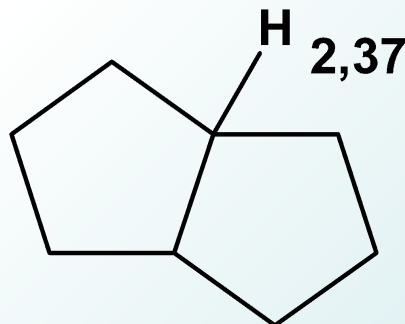
Сигнал протонів
метильної групи



Сигнал протонів
метиленової групи



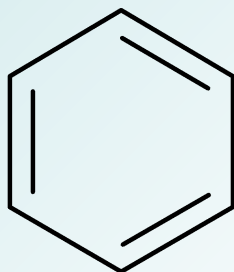
Метинові протони



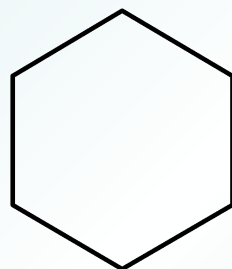


ВІД ЧОГО ЗАЛЕЖИТЬ ХІМІЧНИЙ ЗСУВ?

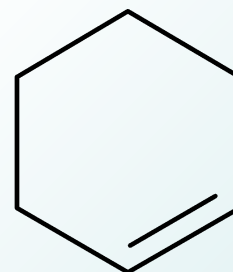
Вплив магнітно-анізотропних груп



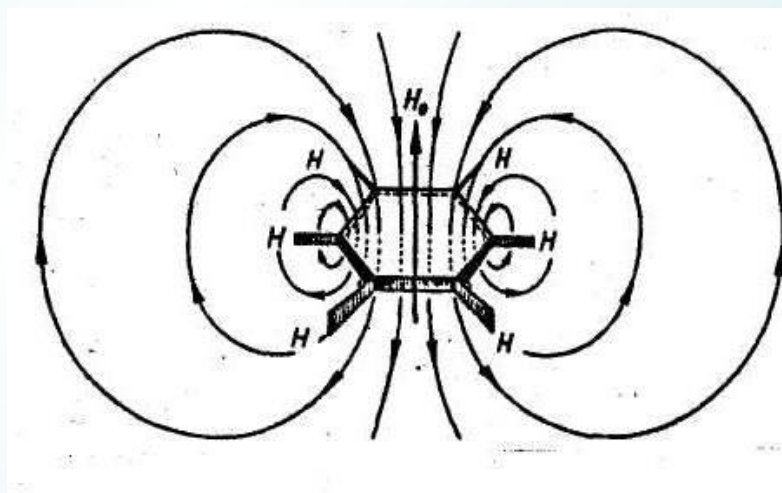
7,27



1,54



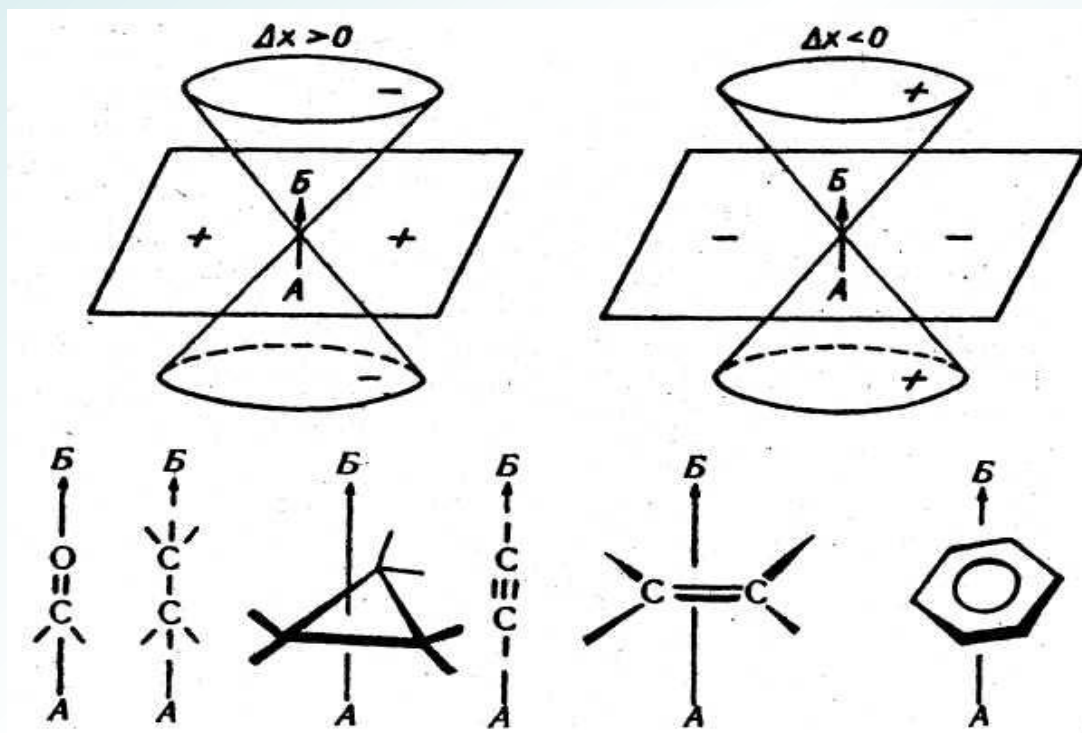
5,59





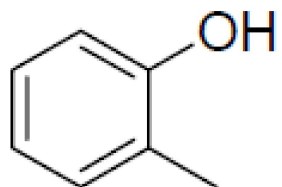
ВІД ЧОГО ЗАЛЕЖИТЬ ХІМІЧНИЙ ЗСУВ?

Вплив магнітно-анізотропних груп

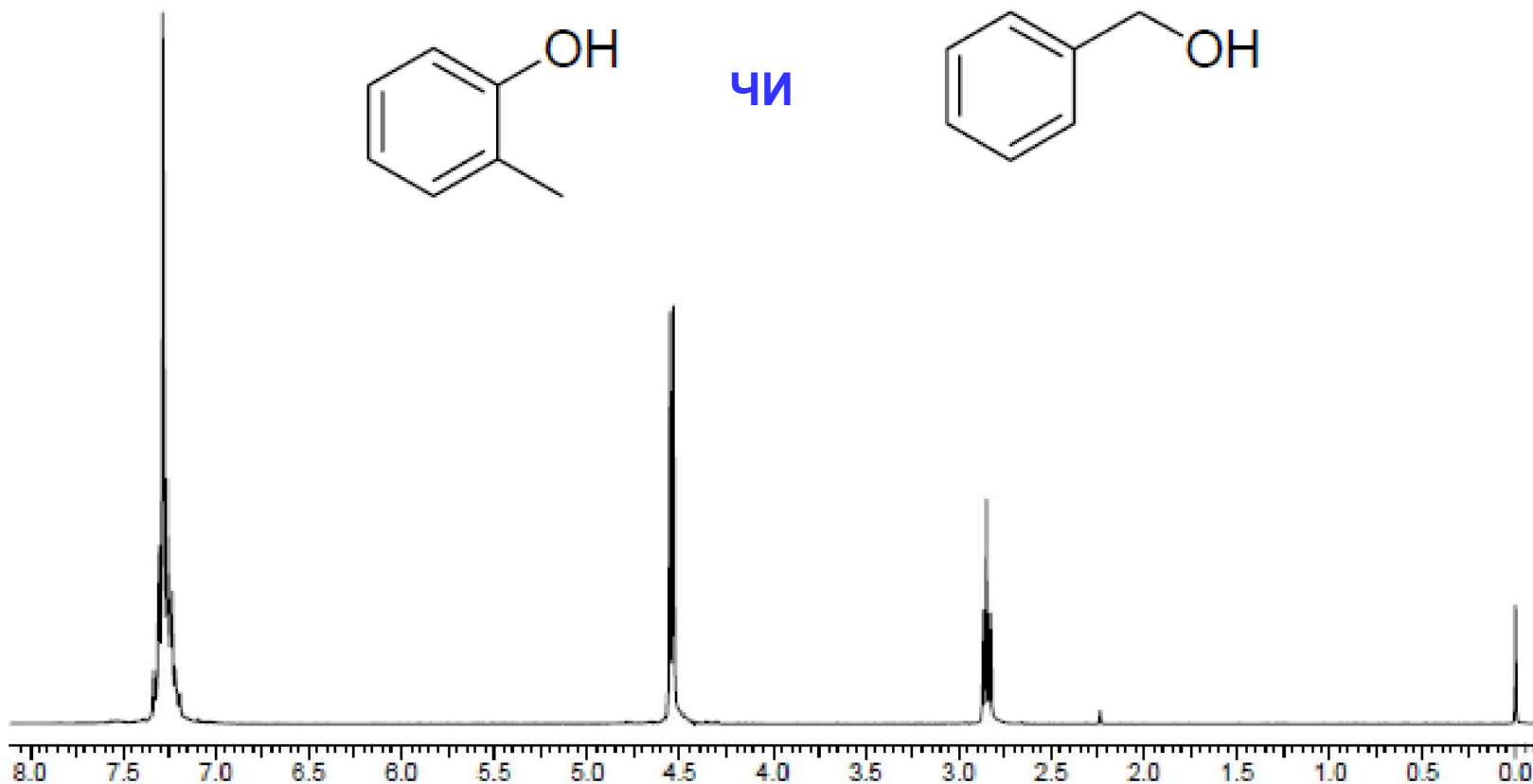
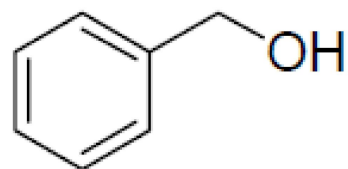


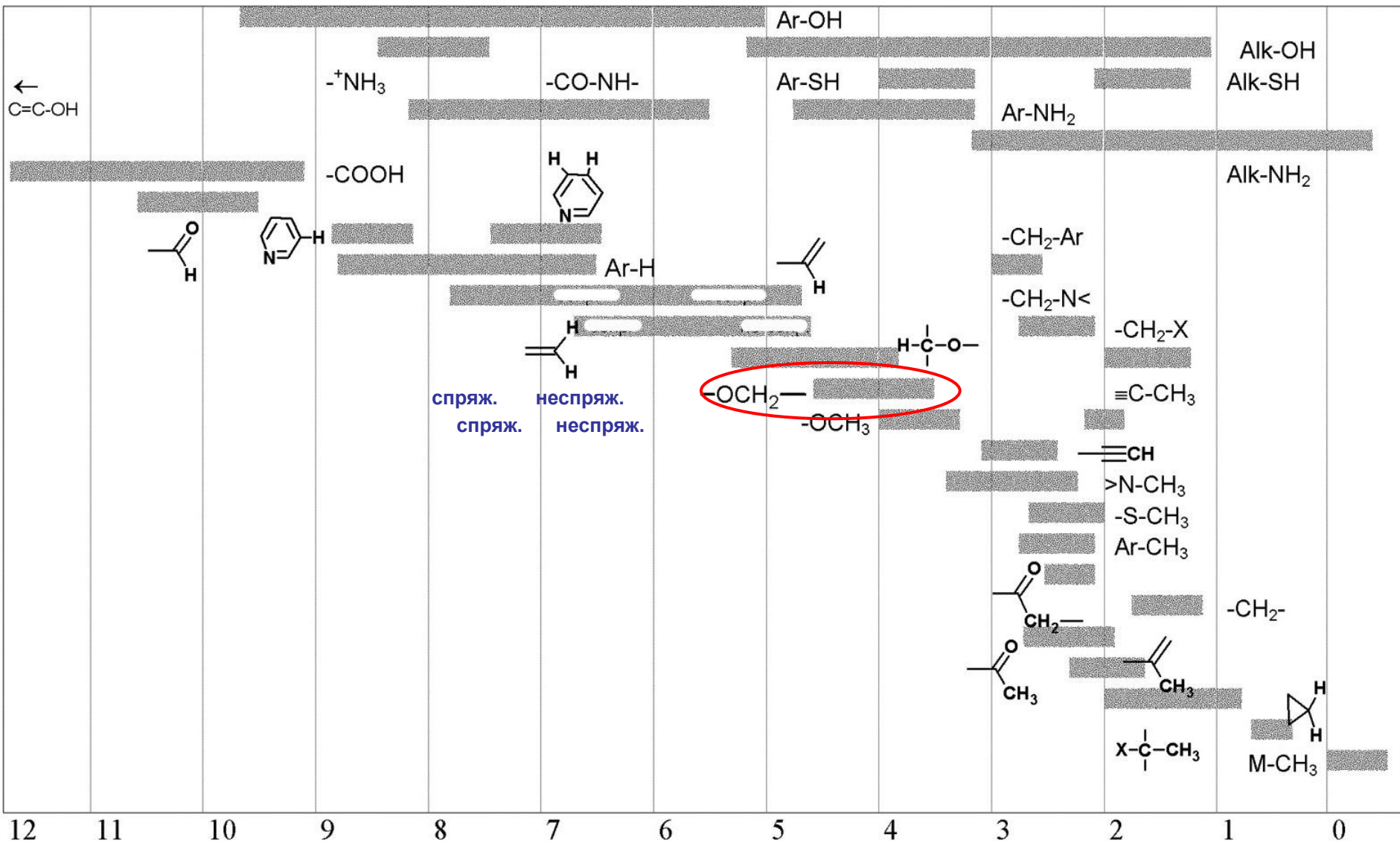


ПРИКЛАД СПЕКТРУ ^1H



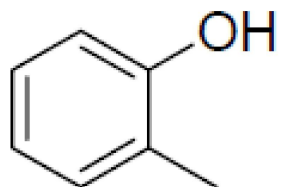
чи



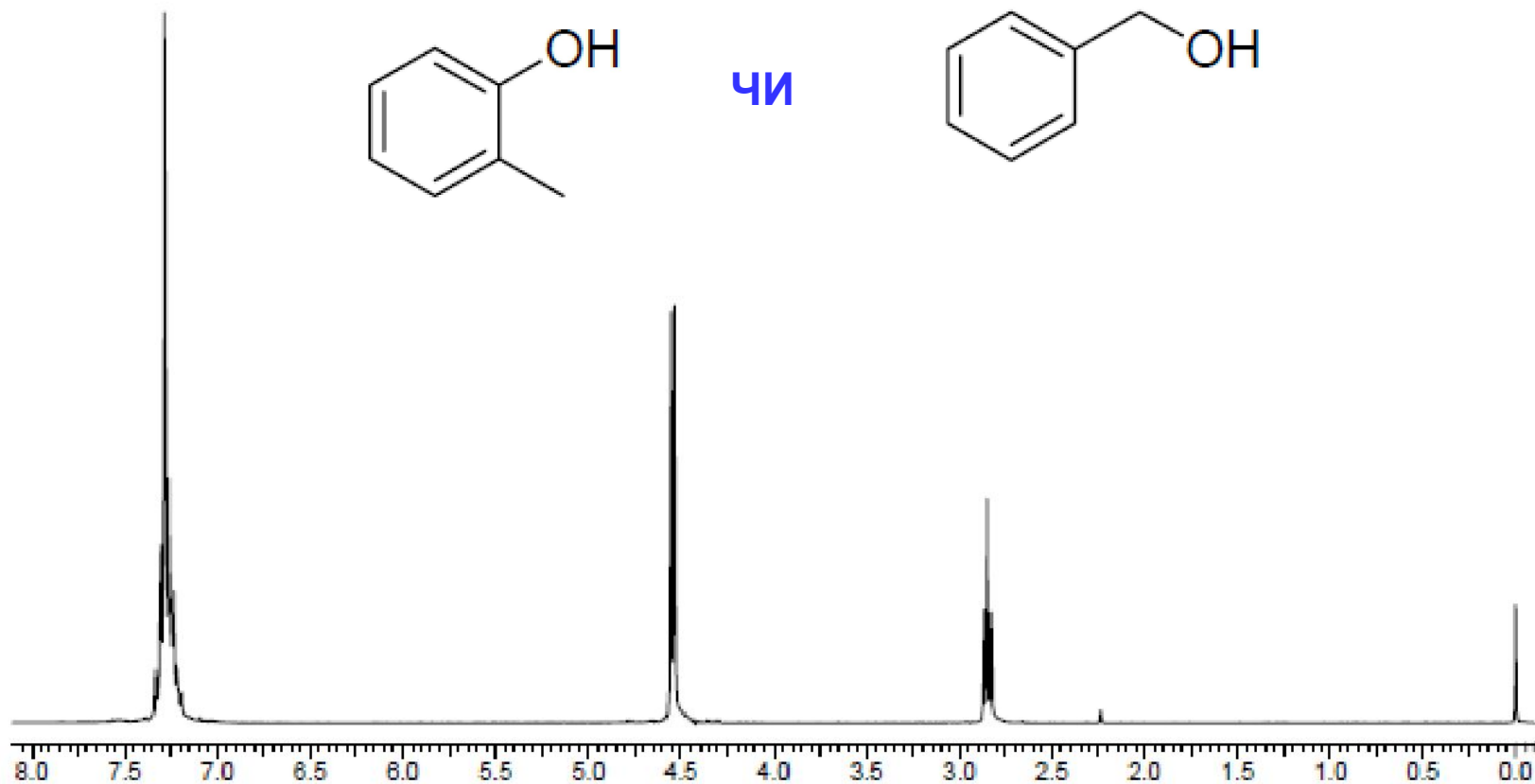
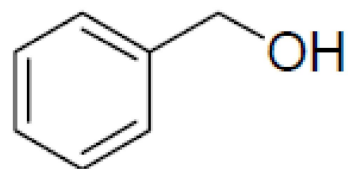




ПРИКЛАД СПЕКТРУ ^1H



чи

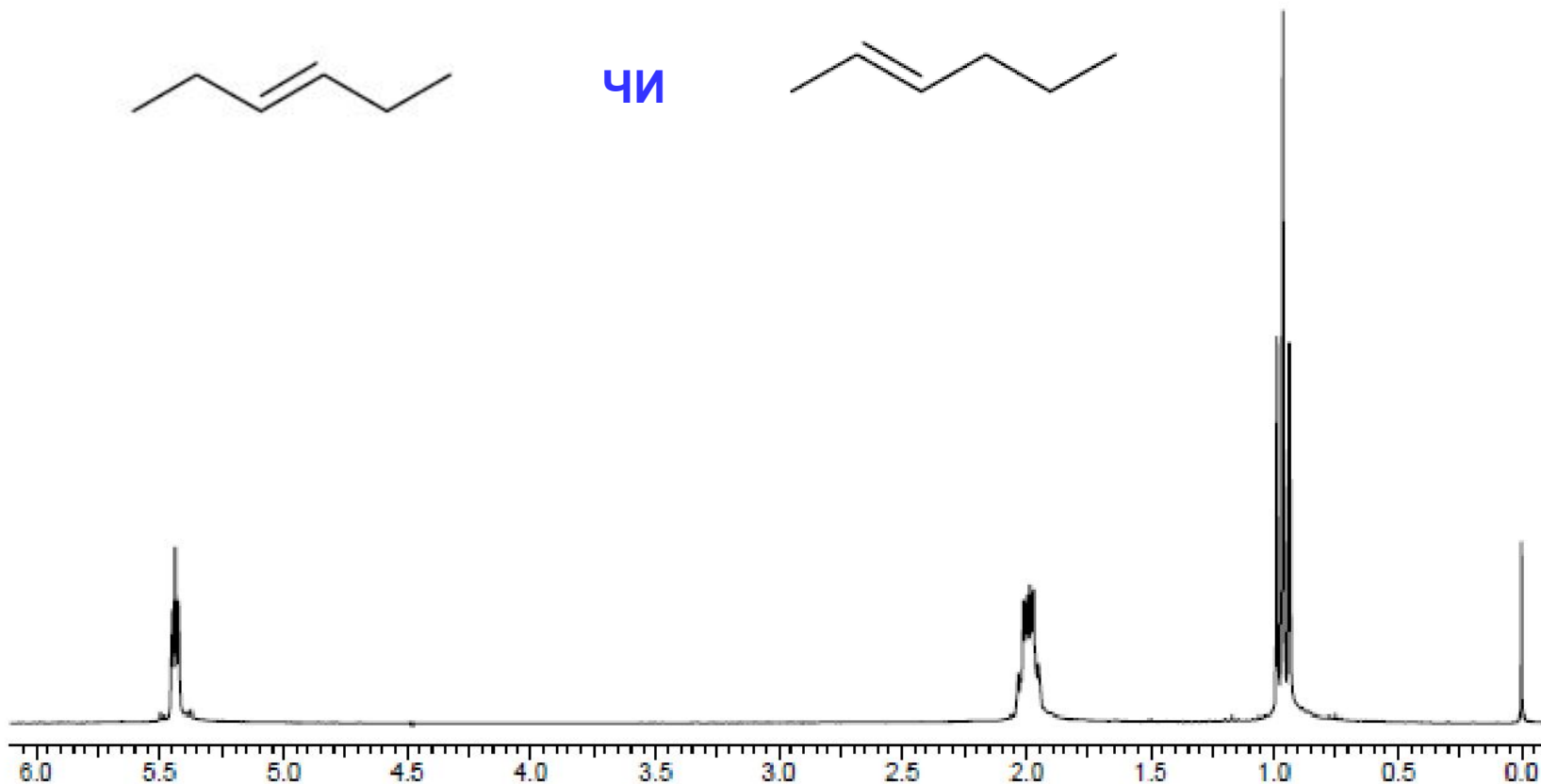




ПРИКЛАД СПЕКТРУ ^1H



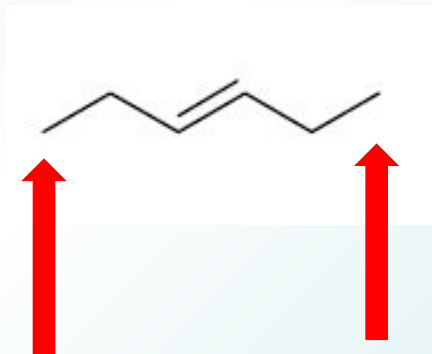
чи





**ЯДРА, ЩО МАЮТЬ ОДНАКОВИЙ ХІМІЧНИЙ ЗСУВ, НАЗИВАЮТЬ
ІЗОХРОННИМИ**

**ЯДРА, ЩО МАЮТЬ ОДНАКОВЕ ХІМІЧНЕ ОТОЧЕННЯ, НАЗИВАЮТЬ
ХІМІЧНО ЕКВІВАЛЕНТНИМИ**

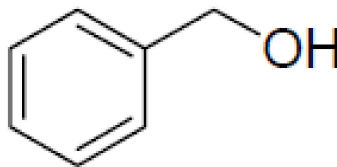


ХІМІЧНО ЕКВІВАЛЕНТНІ ПРОТОНИ МЕТИЛЬНИХ ГРУП

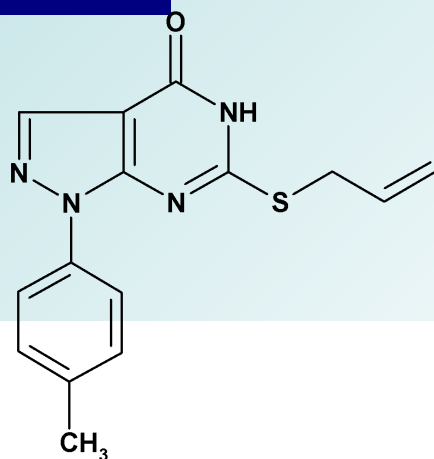


**ЯДРА, ЩО МАЮТЬ ОДНАКОВИЙ ХІМІЧНИЙ ЗСУВ, НАЗИВАЮТЬ
ІЗОХРОННИМИ**

**ЯДРА, ЩО МАЮТЬ ОДНАКОВЕ ХІМІЧНЕ ОТОЧЕННЯ, НАЗИВАЮТЬ
ХІМІЧНО ЕКВІВАЛЕНТНИМИ**



ІЗОХРОННІ АРОМАТИЧНІ ПРОТОНИ



ПРИКЛАД СПЕКТРУ ^1H

