



МОДУЛЬНА КОНТРОЛЬНА  
РОБОТА № 1.  
АНАЛІЗ МАС-СПЕКТРІВ



# ОСНОВНІ ПАРАМЕТРИ СПЕКТРІВ ЯМР.

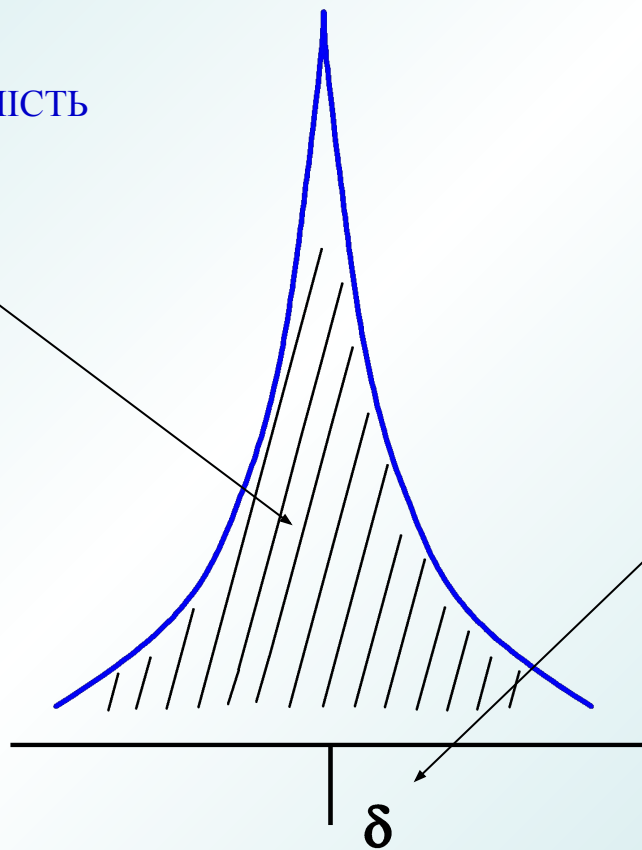
АНАЛІЗ ПРИКЛАДІВ –  
СПЕКТРІВ  $^1\text{H}$ -ЯМР



# ОСНОВНІ ПАРАМЕТРИ СПЕКТРІВ ЯМР

ІНТЕГРАЛЬНА ІНТЕНСИВНІСТЬ

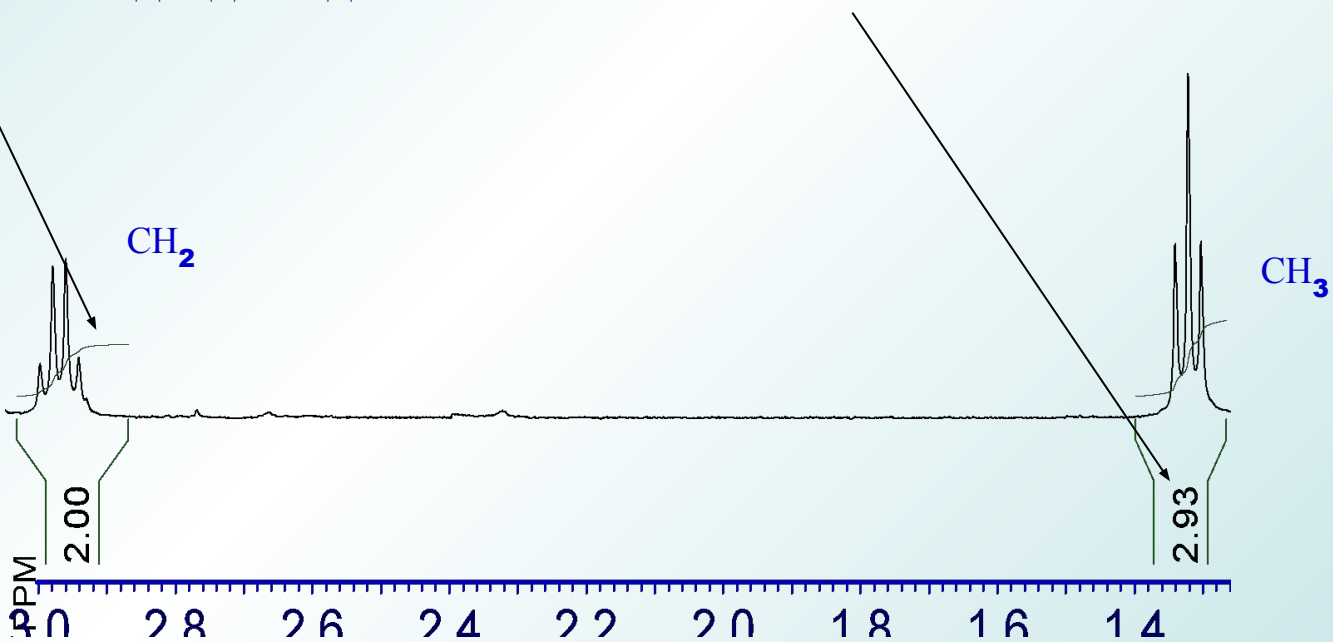
ХІМІЧНИЙ ЗСУВ





# ІНТЕГРАЛЬНА ІНТЕНСИВНІСТЬ

- ПРОПОРЦІЙНА КІЛЬКОСТІ ЯДЕР, ЩО ДАЮТЬ СИГНАЛ
- ВИМІРЮЄТЬСЯ У ВІДНОСНИХ ОДИНИЦЯХ
- ВІДОБРАЖАЄТЬСЯ НА СПЕКТРАХ ЯМР У ВИГЛЯДІ ІНТЕГРАЛЬНОЇ КРИВОЇ АБО ЧИСЕЛ ПІД ВІДПОВІДНИМИ СИГНАЛАМИ

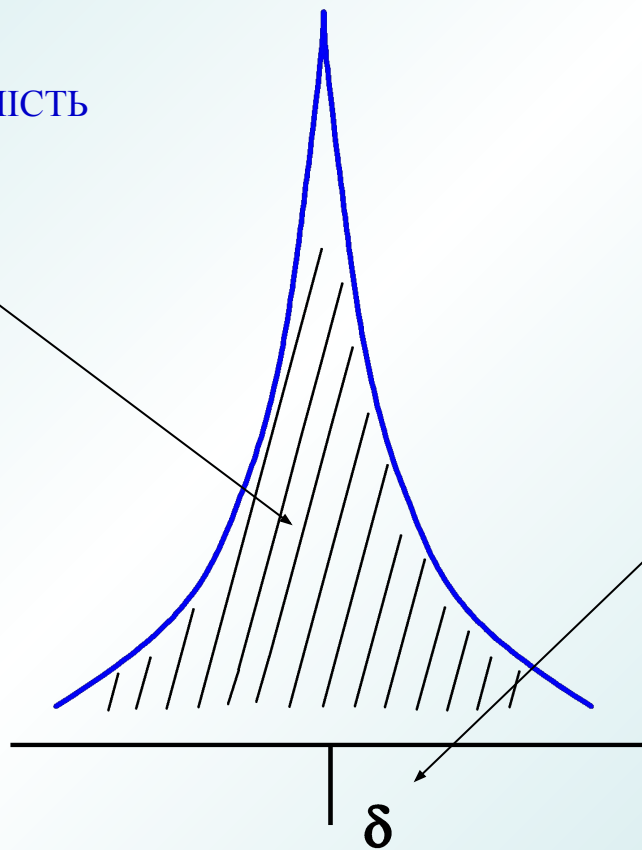




# ОСНОВНІ ПАРАМЕТРИ СПЕКТРІВ ЯМР

ІНТЕГРАЛЬНА ІНТЕНСИВНІСТЬ

ХІМІЧНИЙ ЗСУВ



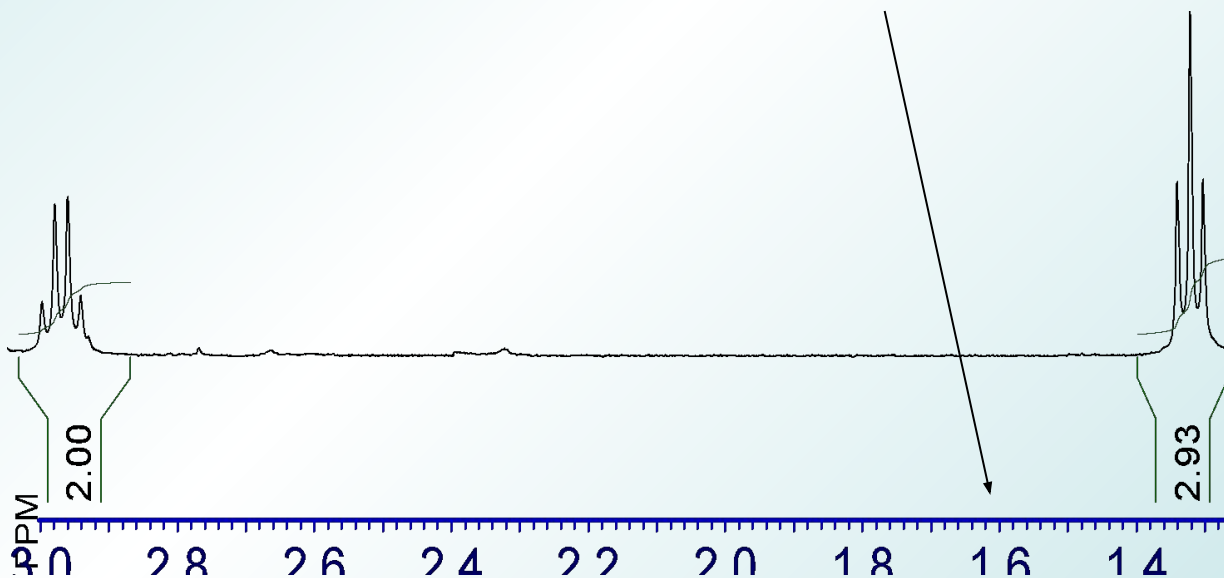


## ХІМІЧНИЙ ЗСУВ

- ХАРАКТЕРИЗУЄ ХІМІЧНЕ ОТОЧЕННЯ ЯДЕР, ЩО ДАЮТЬ СИГНАЛ
- ВИМІРЮЄТЬСЯ У БЕЗРОЗМІРНИХ ОДИНИЦЯХ

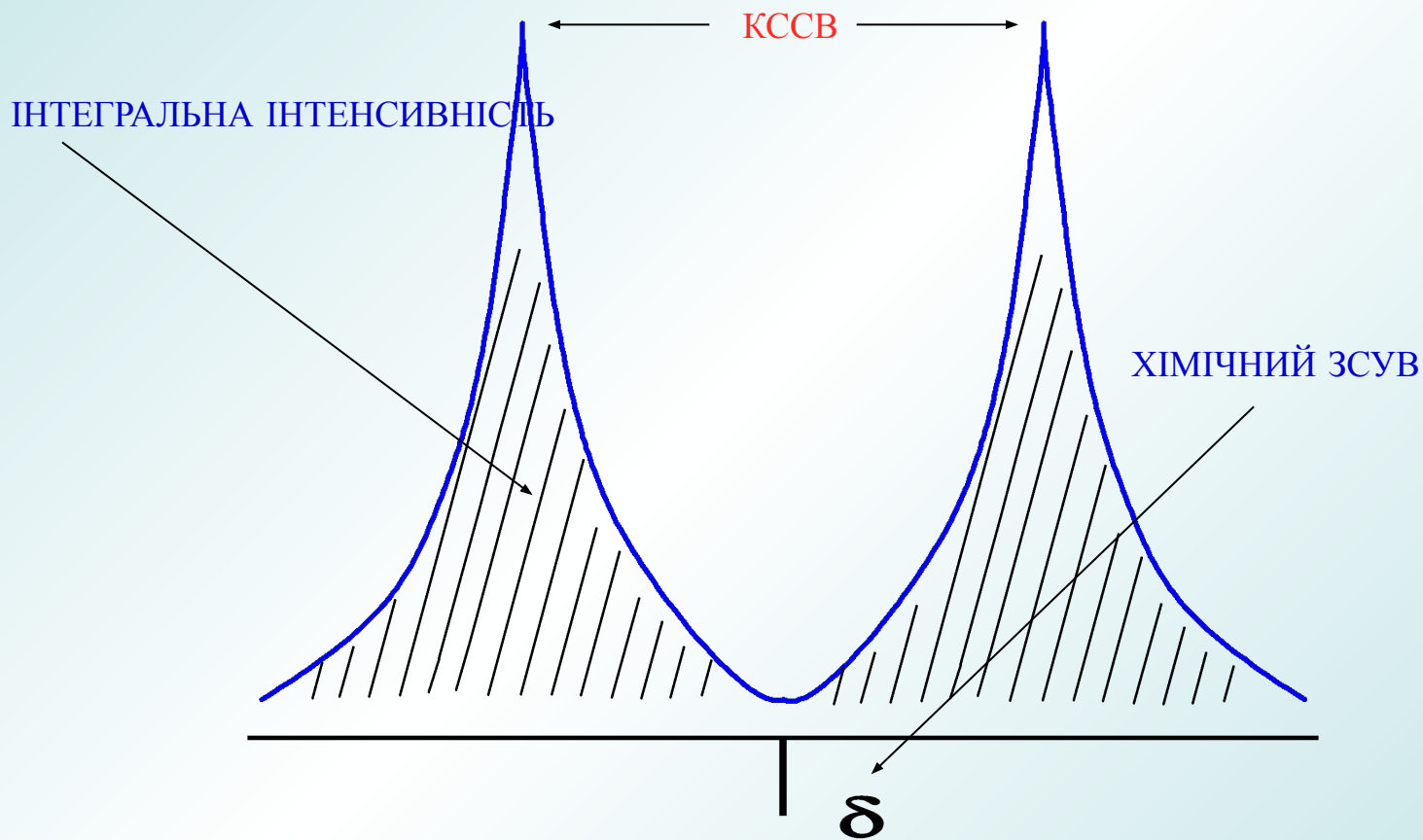
$$\delta = 10^6 \times (\nu_{\text{сигналу}} - \nu_{\text{еталону}}) / \nu_0$$

- ВІДОБРАЖАЄТЬСЯ НА СПЕКТРАХ ЯМР НА ШКАЛІ ХІМІЧНИХ ЗСУВІВ





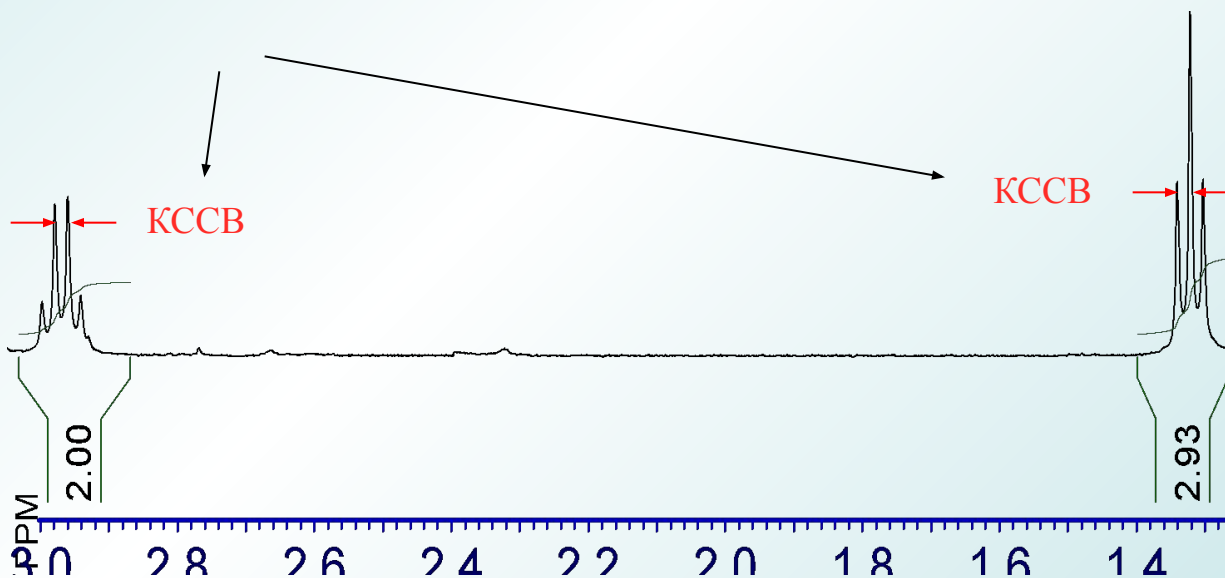
# ОСНОВНІ ПАРАМЕТРИ СПЕКТРІВ ЯМР





## КОНСТАНТА СПІН-СПІНОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ

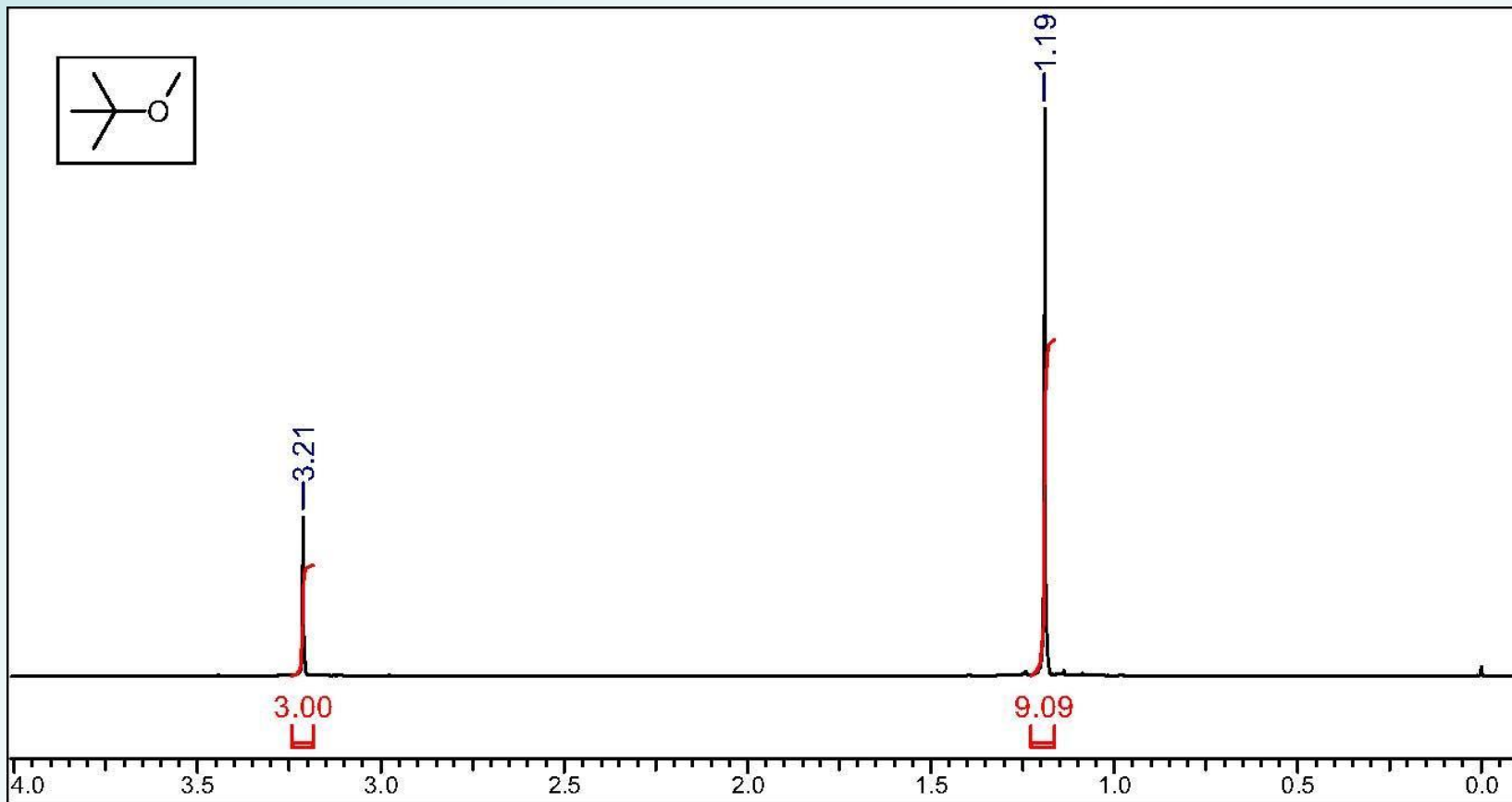
- ХАРАКТЕРИЗУЄ ХІМІЧНІ ЗВ'ЯЗКИ, ЧЕРЕЗ ЯКІ ПЕРЕДАЄТЬСЯ СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ
- ВИМІРЮЄТЬСЯ В ОДИНИЦЯХ ЧАСТОТИ - ГЕРЦАХ
- НА СПЕКТРАХ ЯМР КССВ – ЦЕ ВІДСТАНЬ МІЖ КОМПОНЕНТАМИ В МУЛЬТИПЛЕТАХ





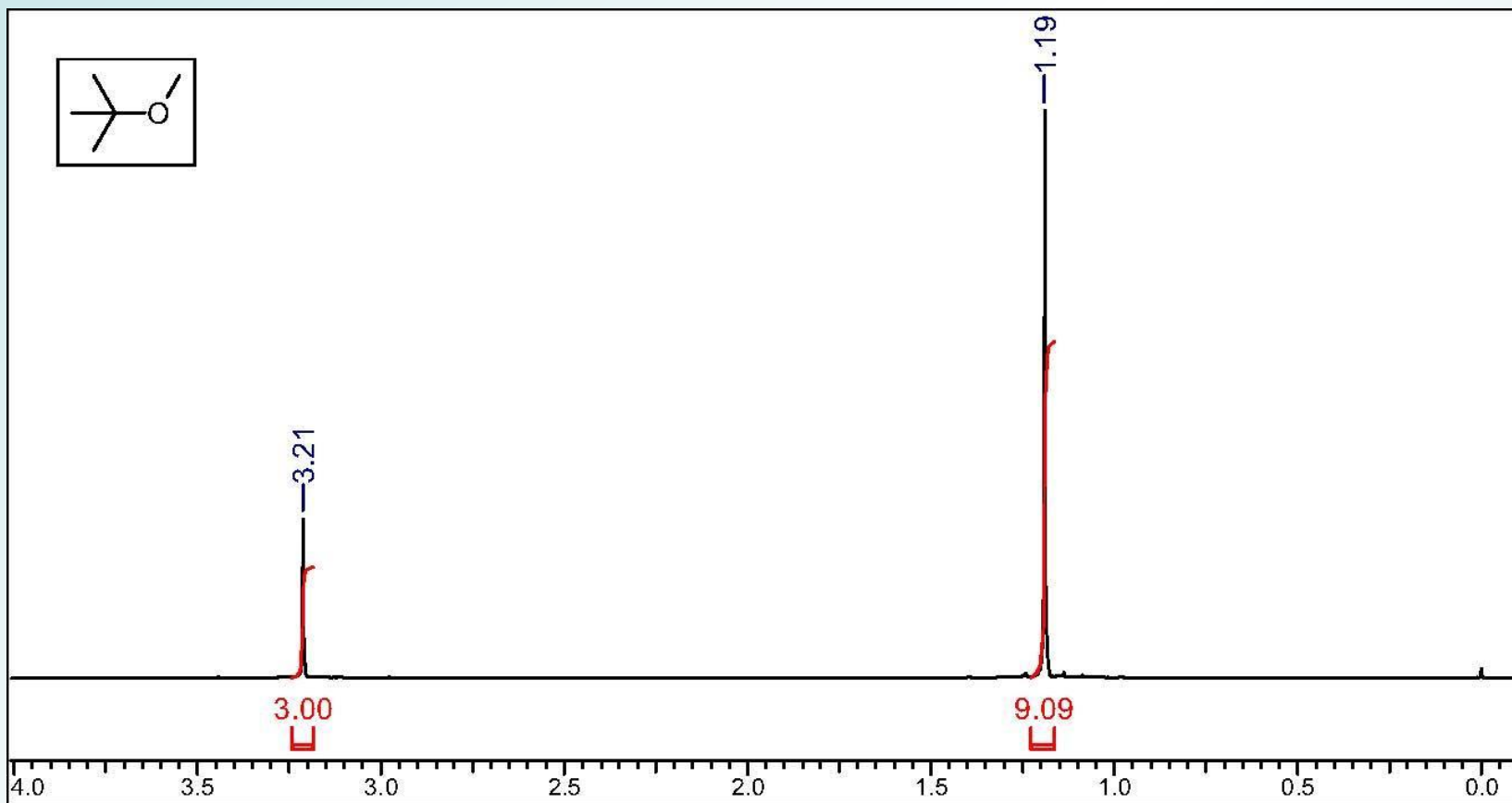


# ІНТЕГРАЛЬНА ІНТЕНСИВНІСТЬ



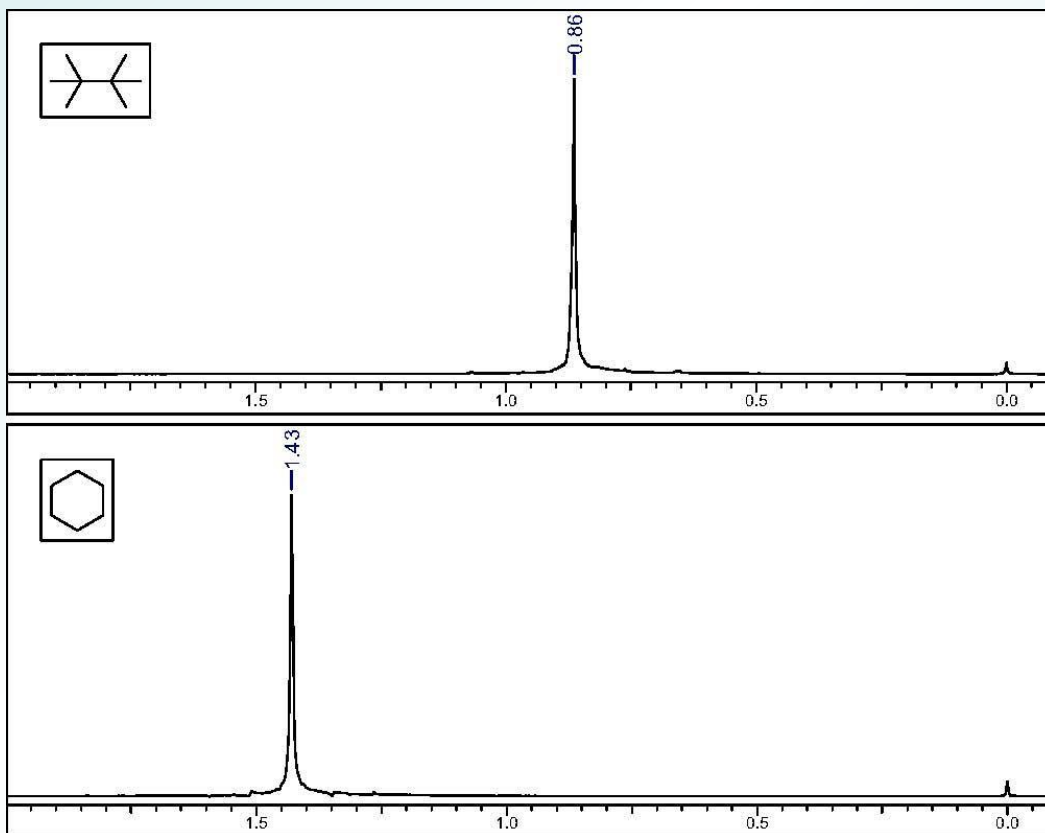
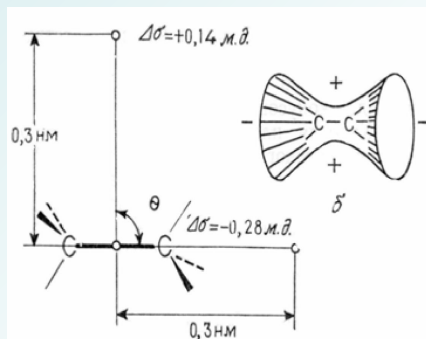


# ХІМІЧНИЙ ЗСУВ – ЕЛЕКТРОННІ ЕФЕКТИ



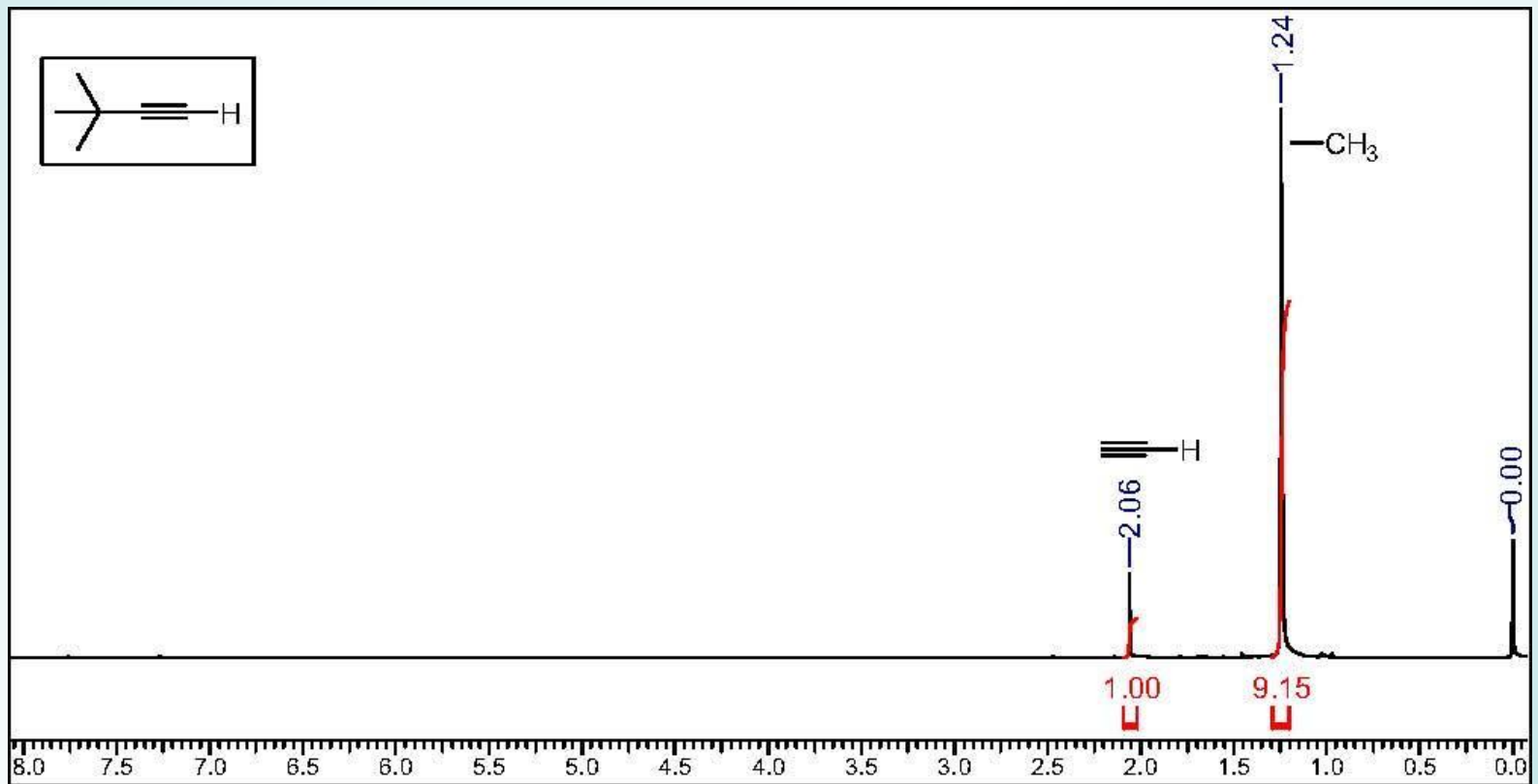
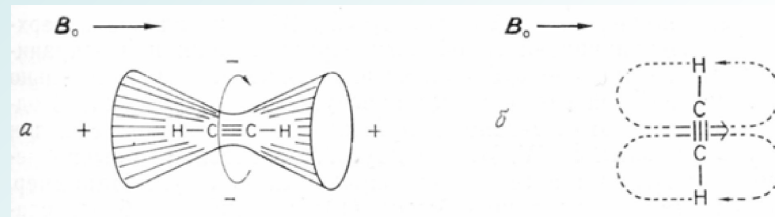


# ХІМІЧНИЙ ЗСУВ – ЕФЕКТИ АНІЗОТРОПІЇ



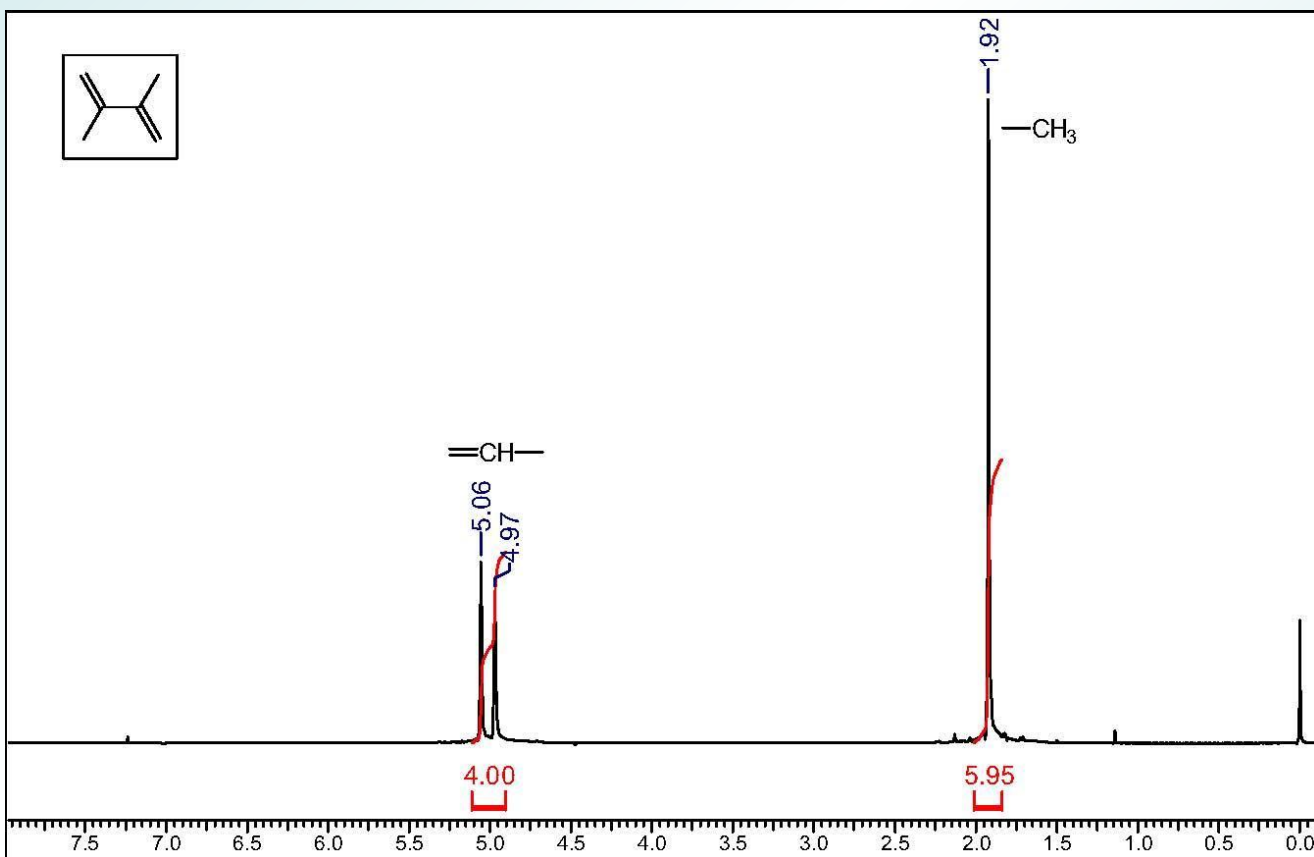
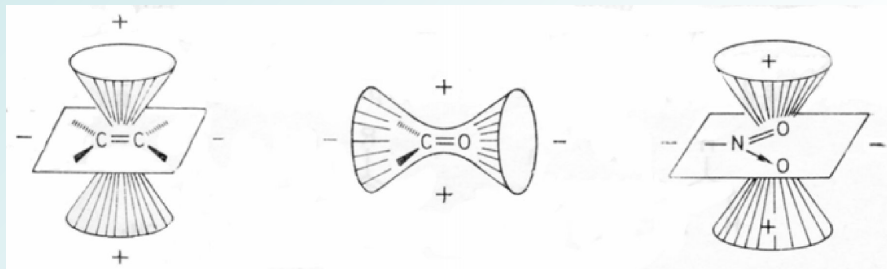


# ХІМІЧНИЙ ЗСУВ – ЕФЕКТИ АНІЗОТРОПІЇ



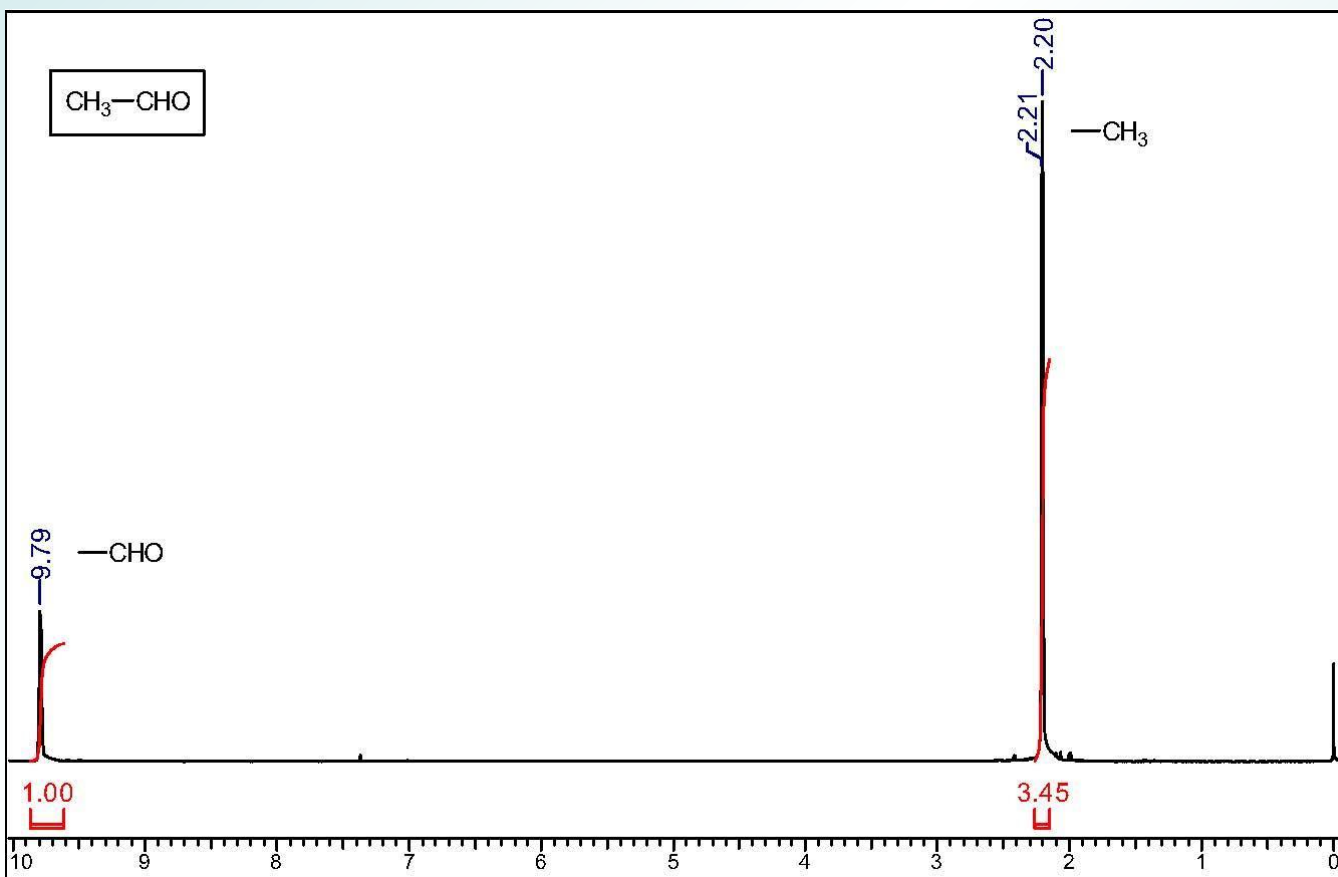
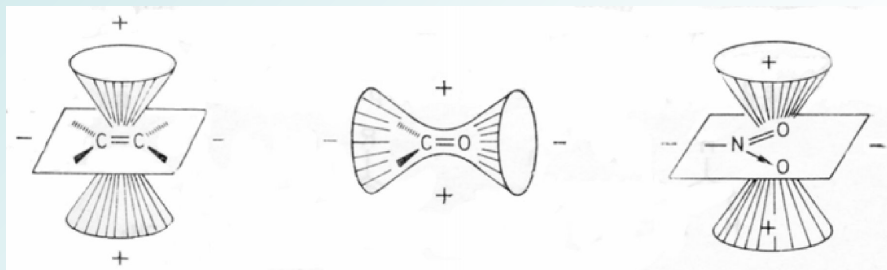


# ХІМІЧНИЙ ЗСУВ – ЕФЕКТИ АНІЗОТРОПІЇ



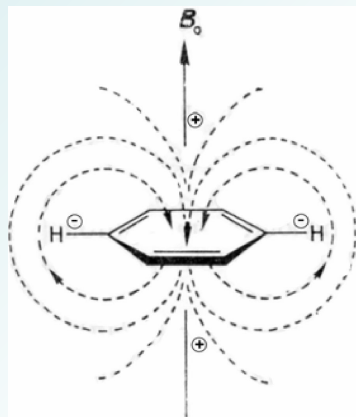


# ХІМІЧНИЙ ЗСУВ – ЕФЕКТИ АНІЗОТРОПІЇ

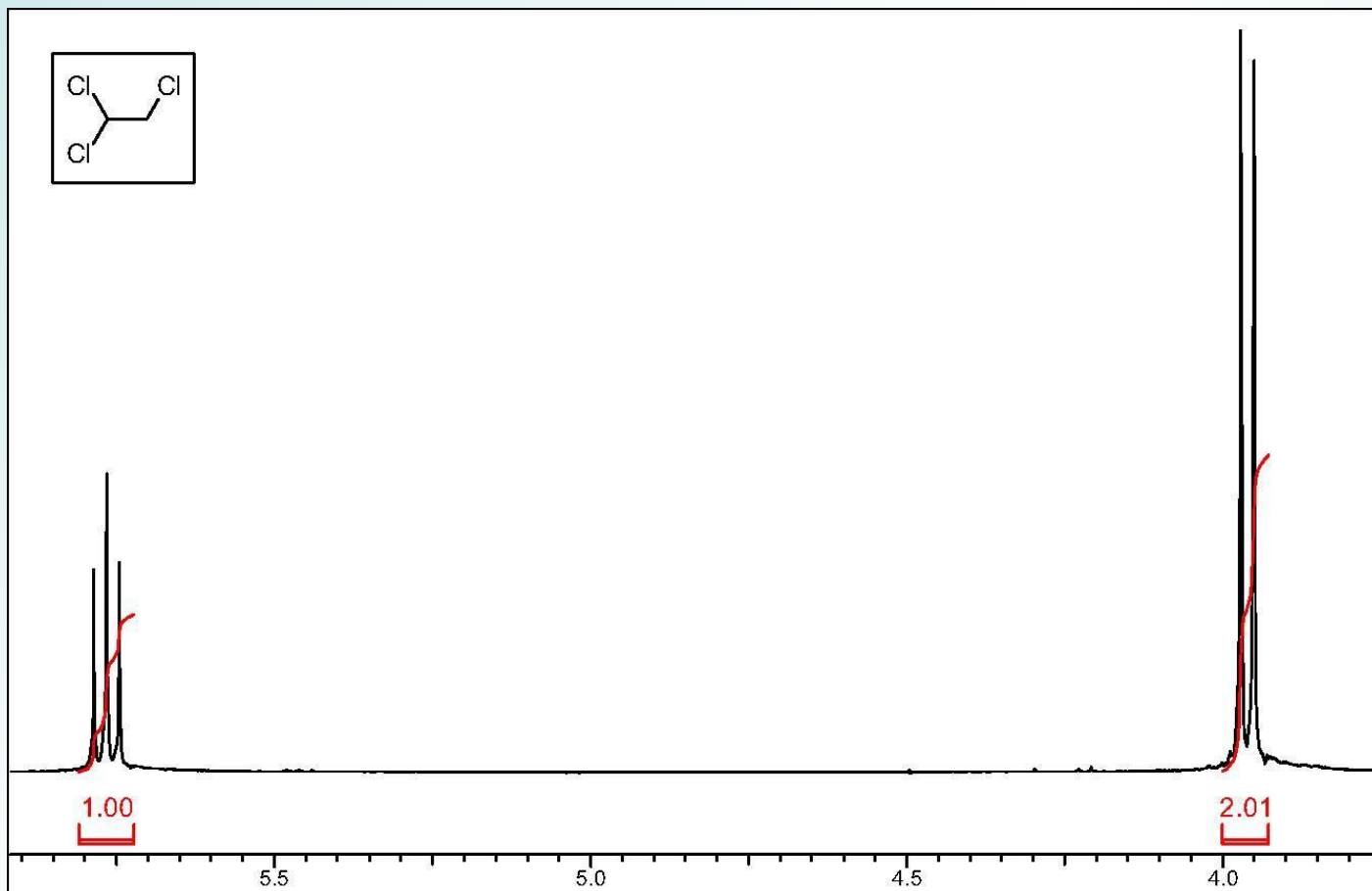




# ХІМІЧНИЙ ЗСУВ – ЕФЕКТИ АНІЗОТРОПІЇ

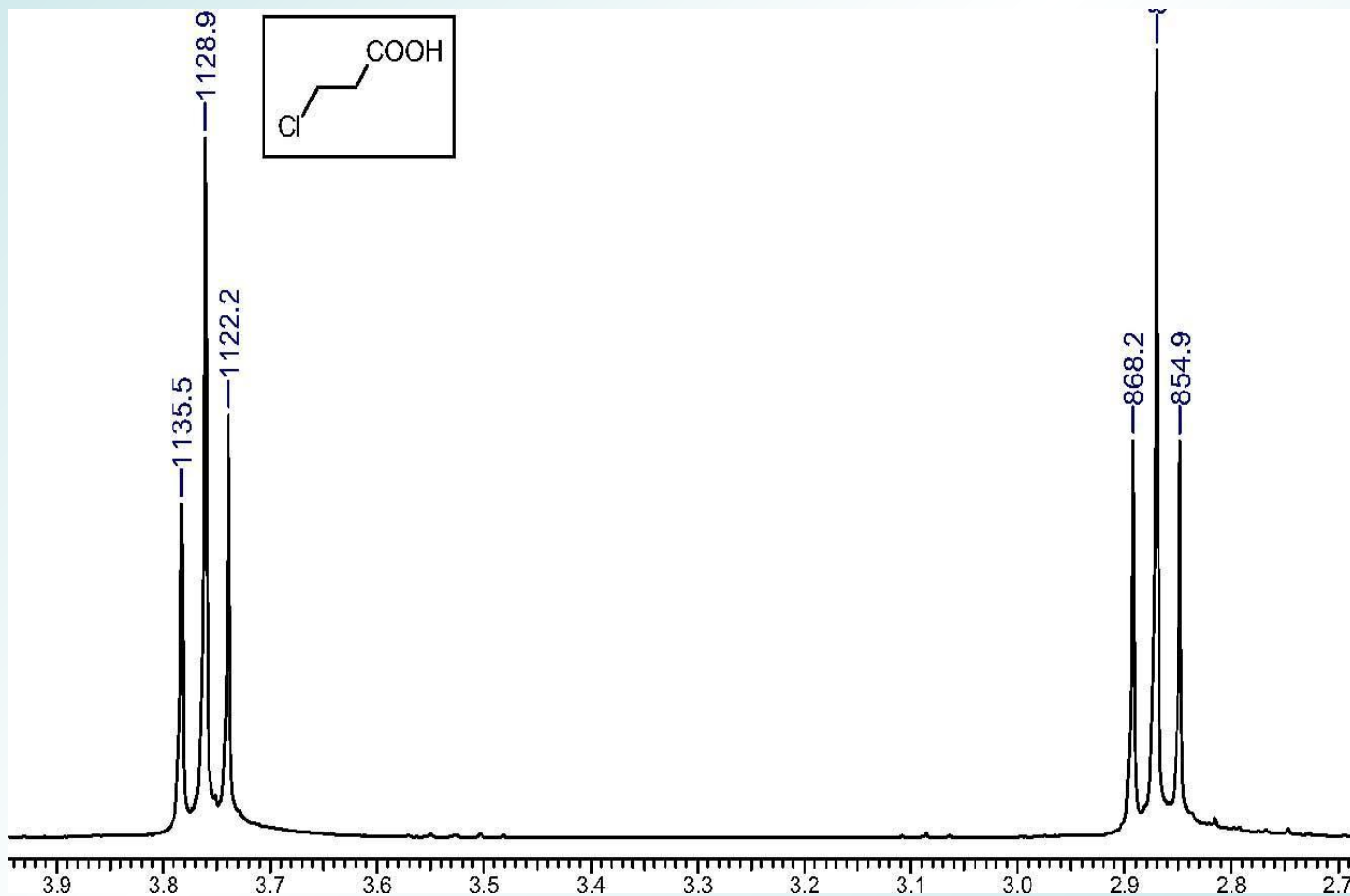


# КОНСТАНТИ СПІН-СПІНОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ

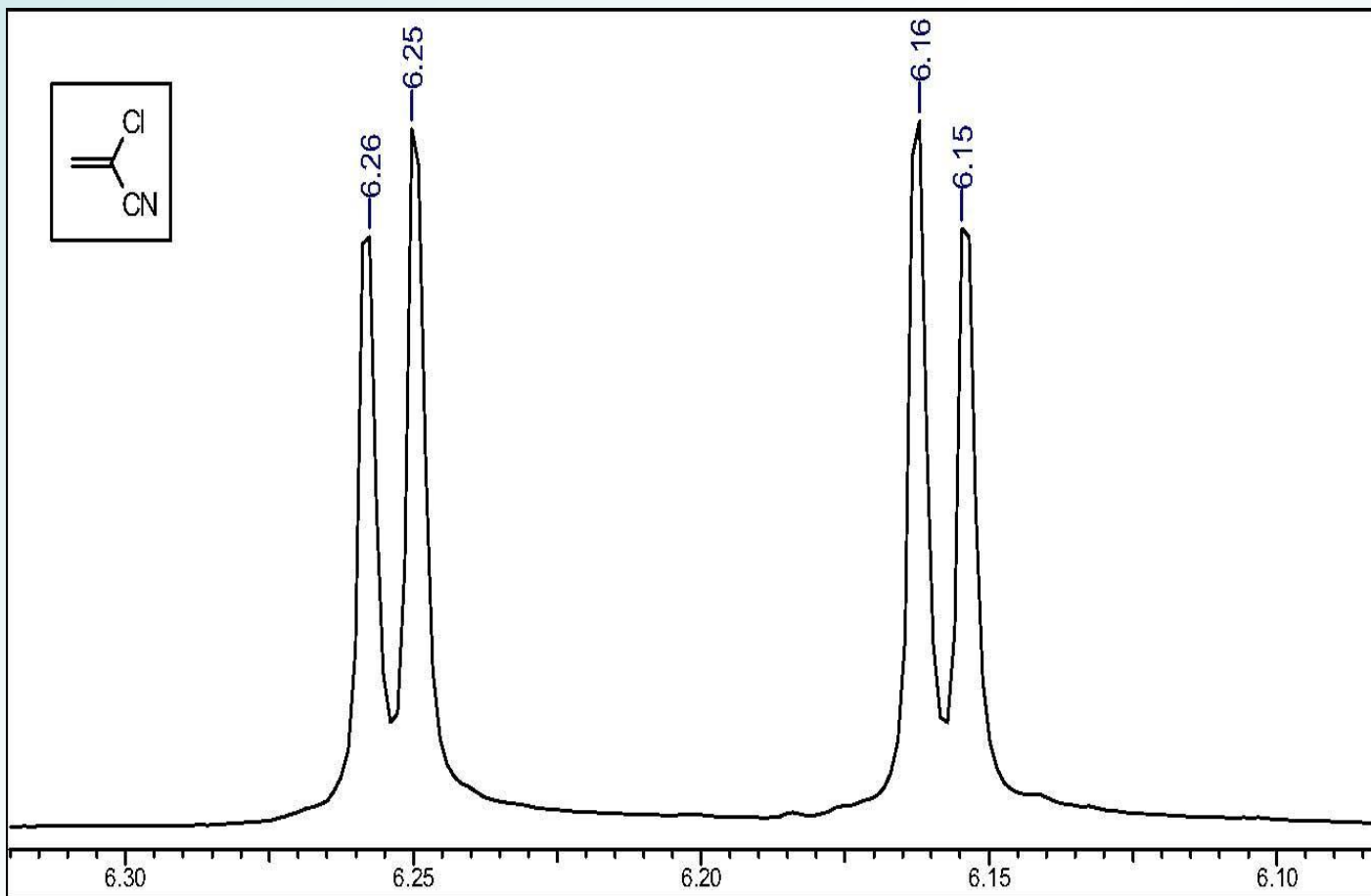




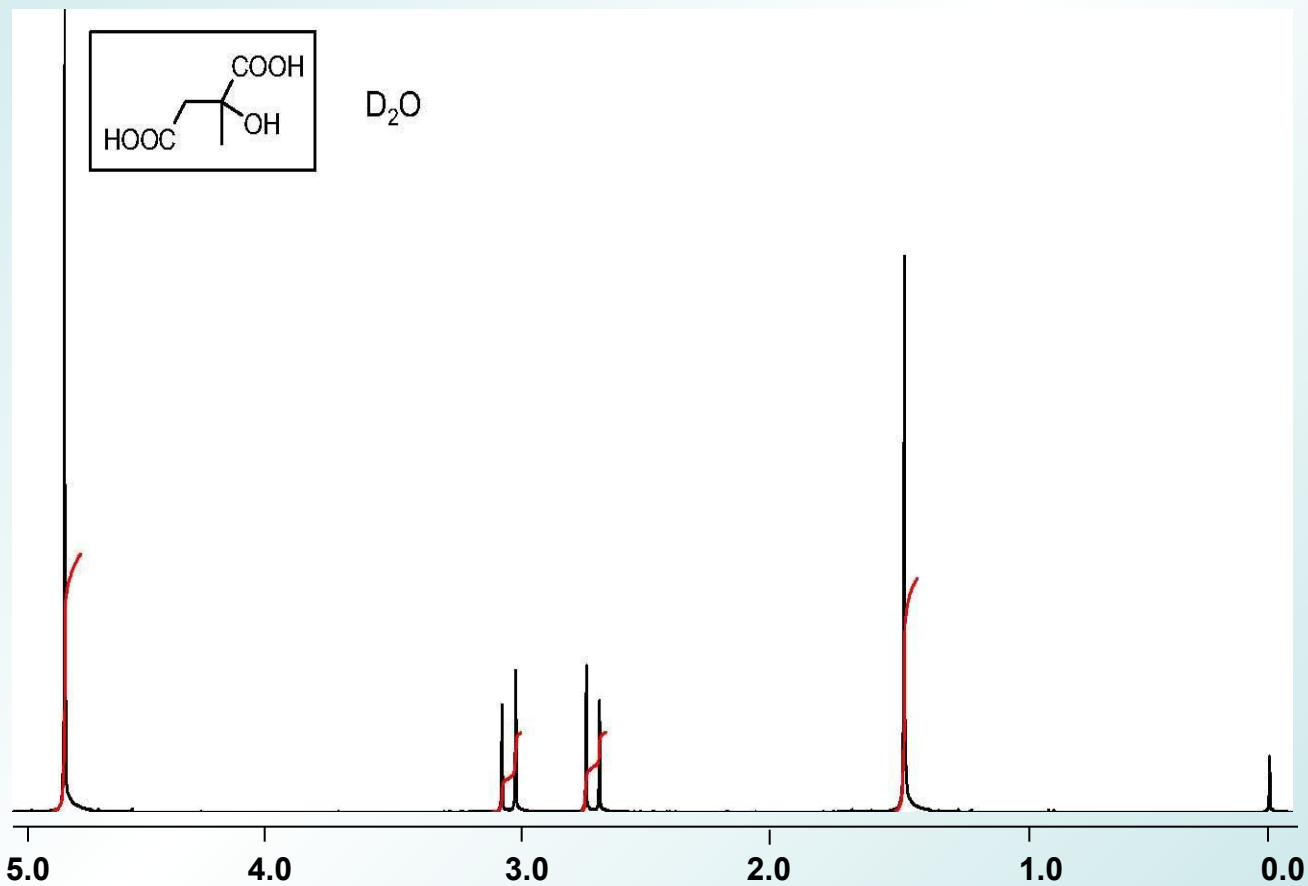
# КОНСТАНТИ СПІН-СПІНОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ



# КОНСТАНТИ СПІН-СПІНОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ



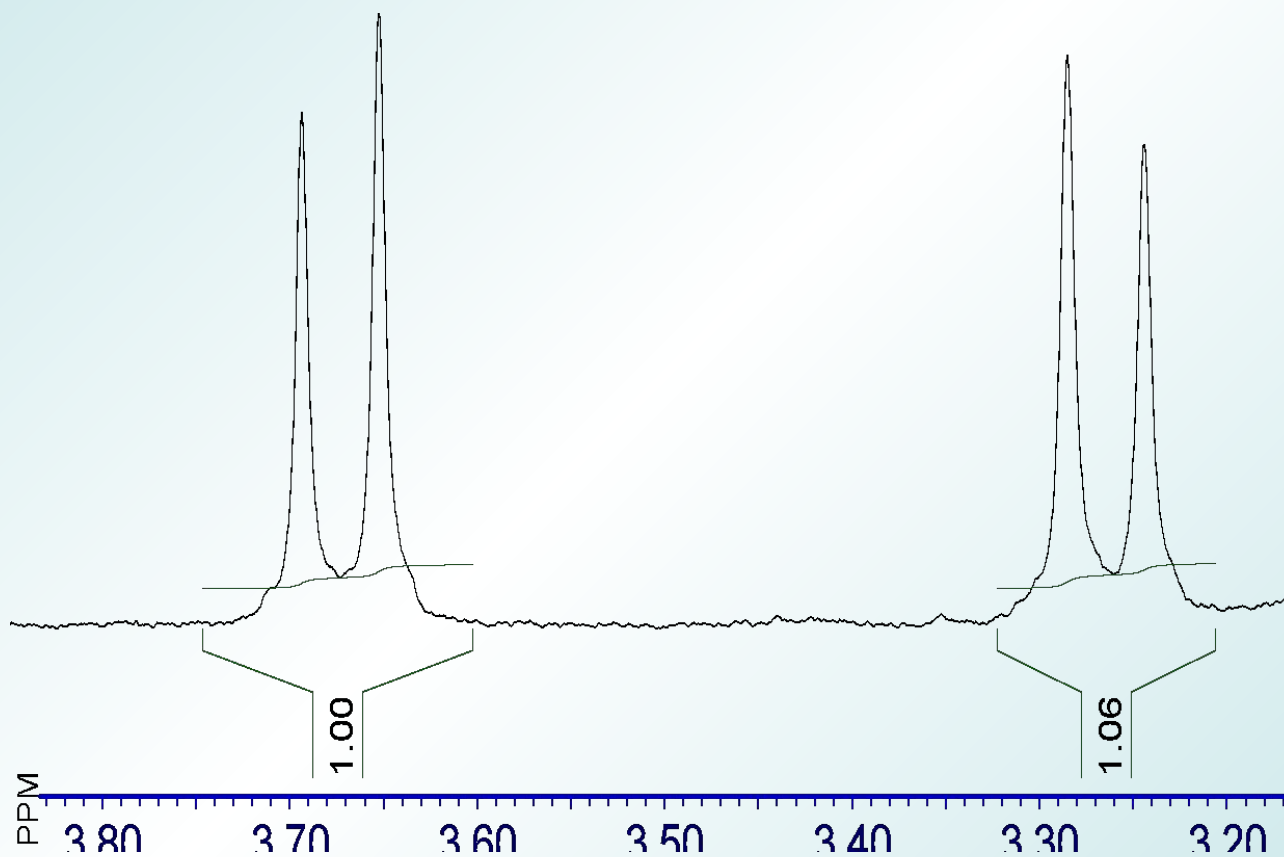
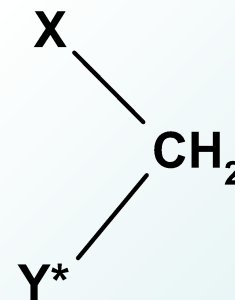
# КОНСТАНТИ СПІН-СПІНОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ





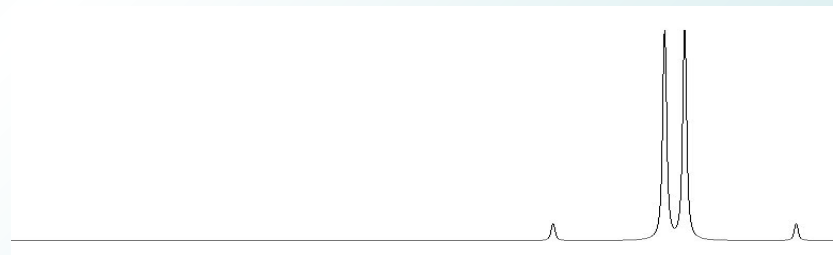
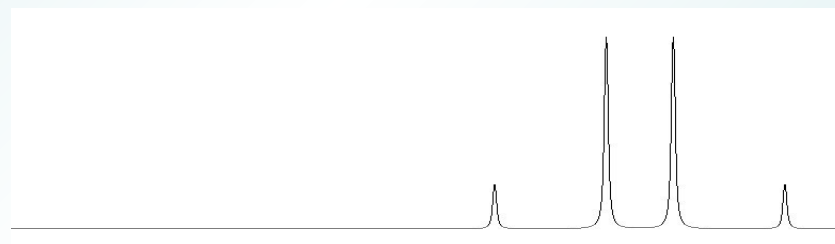
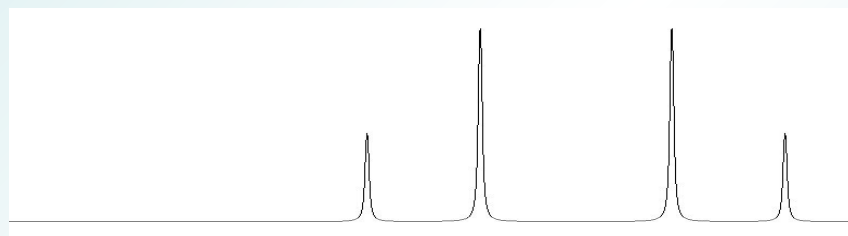
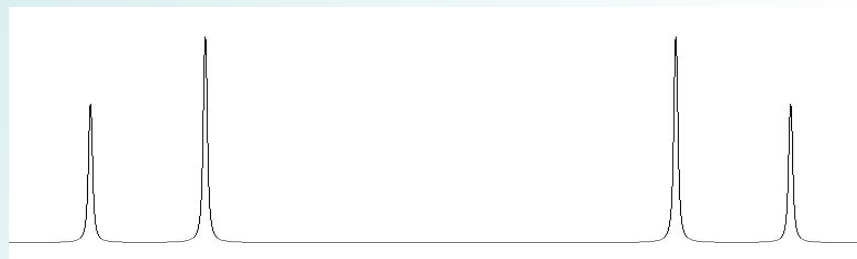
# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ

**AB**



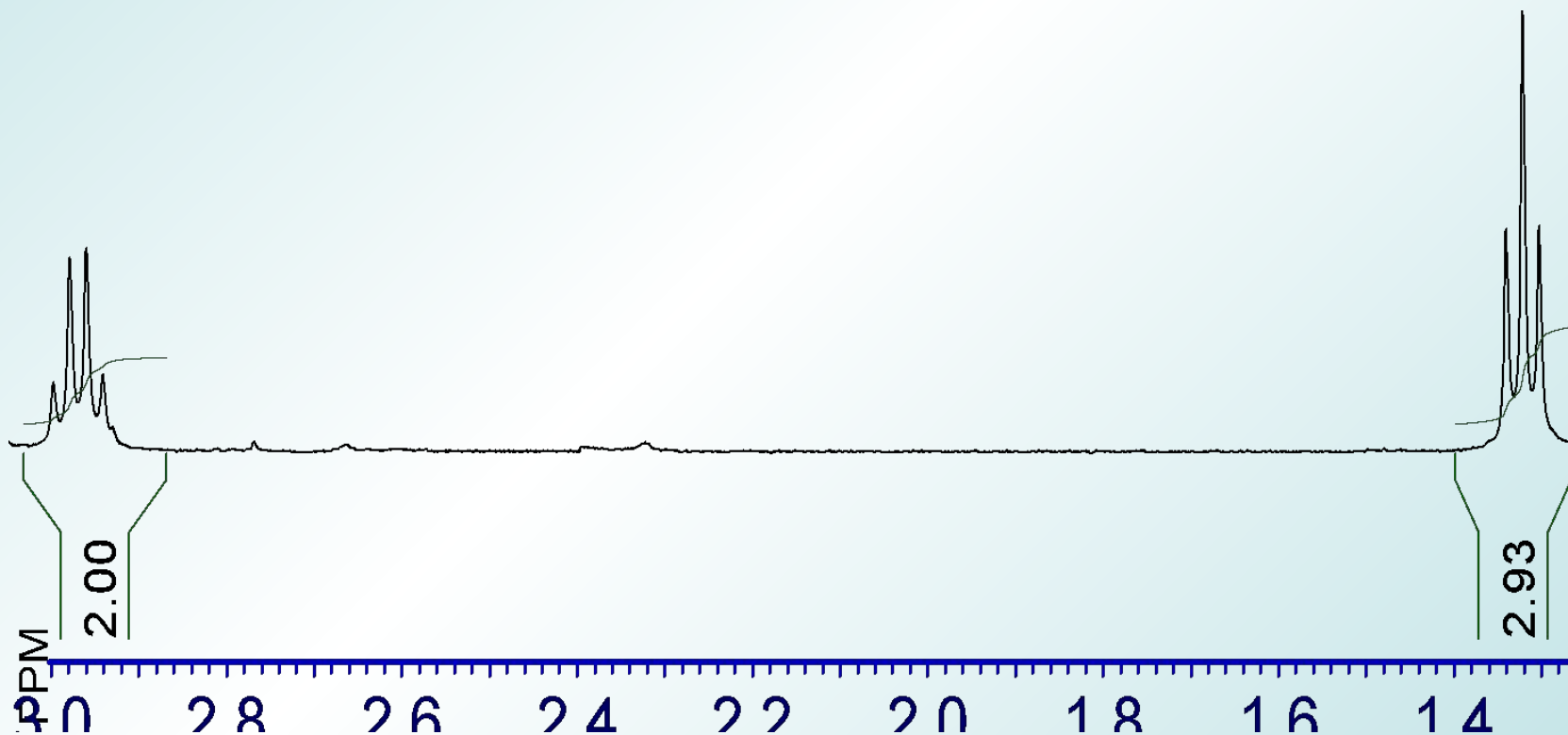
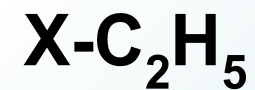


# СПІНОВА СИСТЕМА АВ – ЕФЕКТИ “ВИЩОГО ПОРЯДКУ”





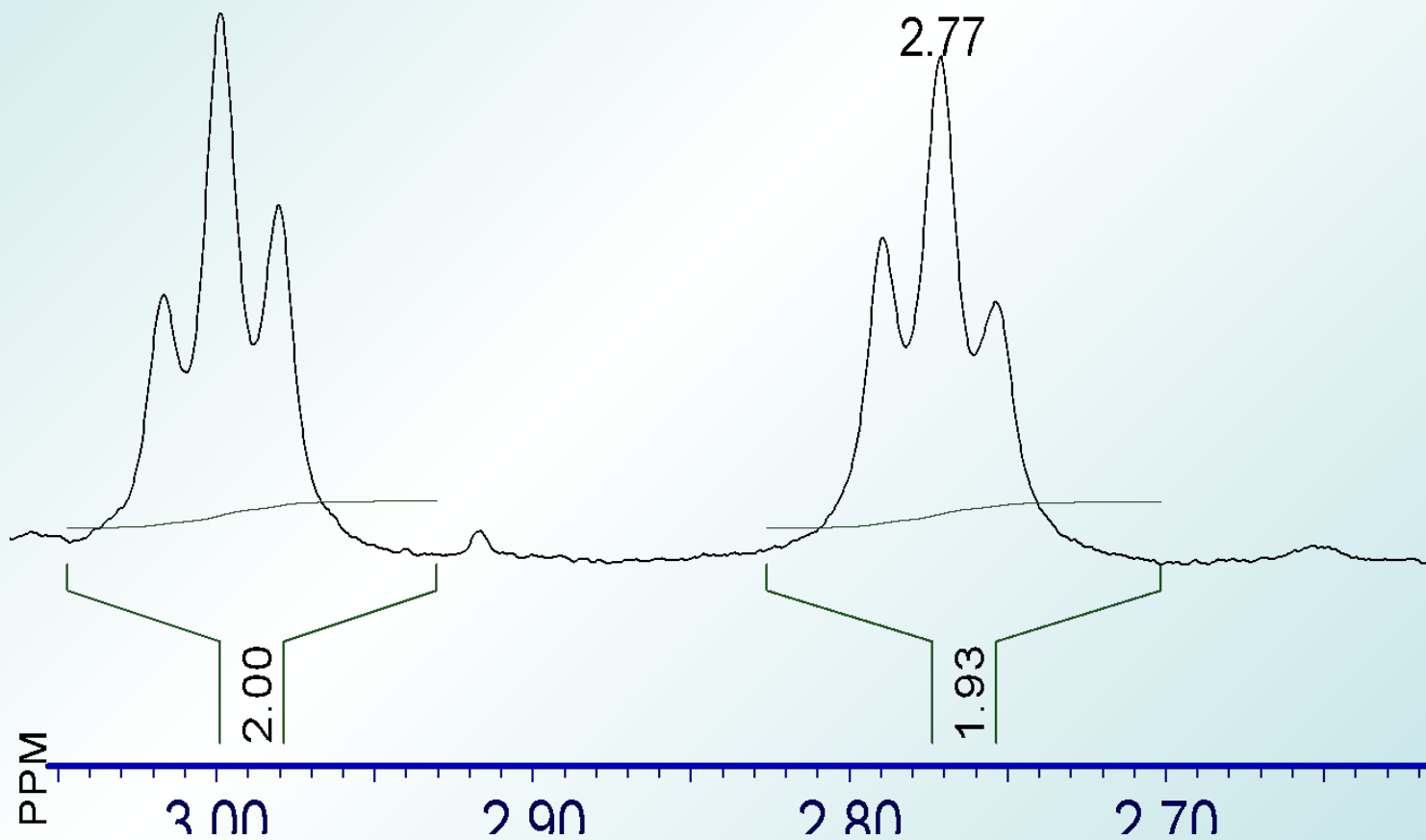
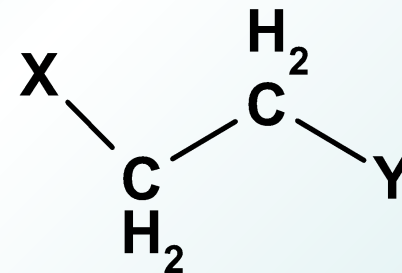
# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ





# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ

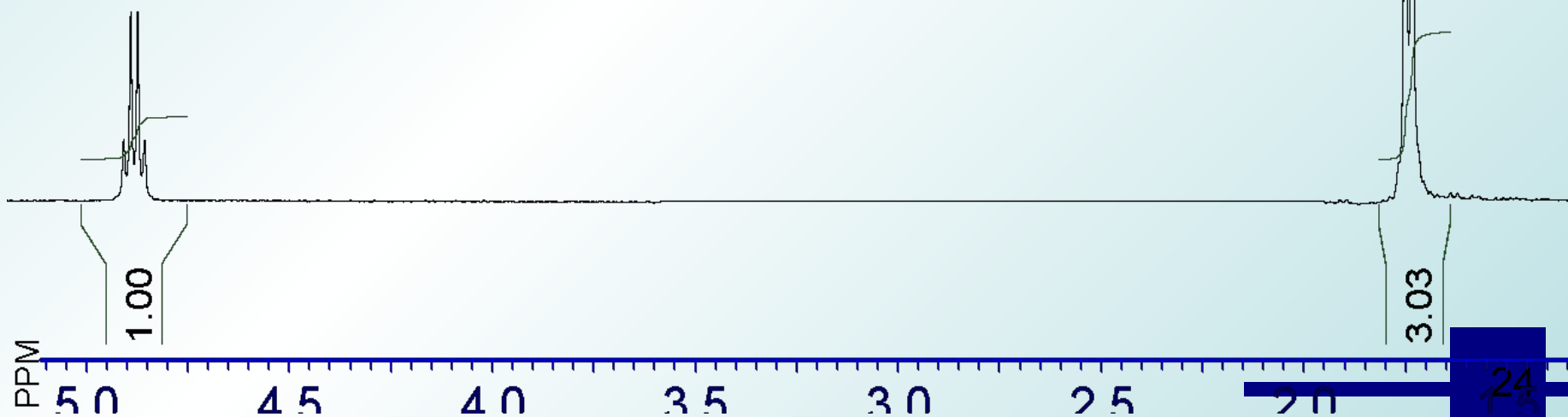
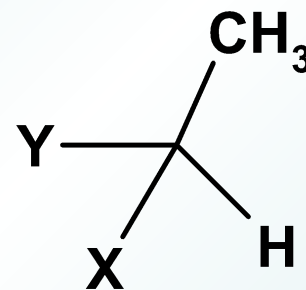
$A_2X_2$





# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ

$A_3X$

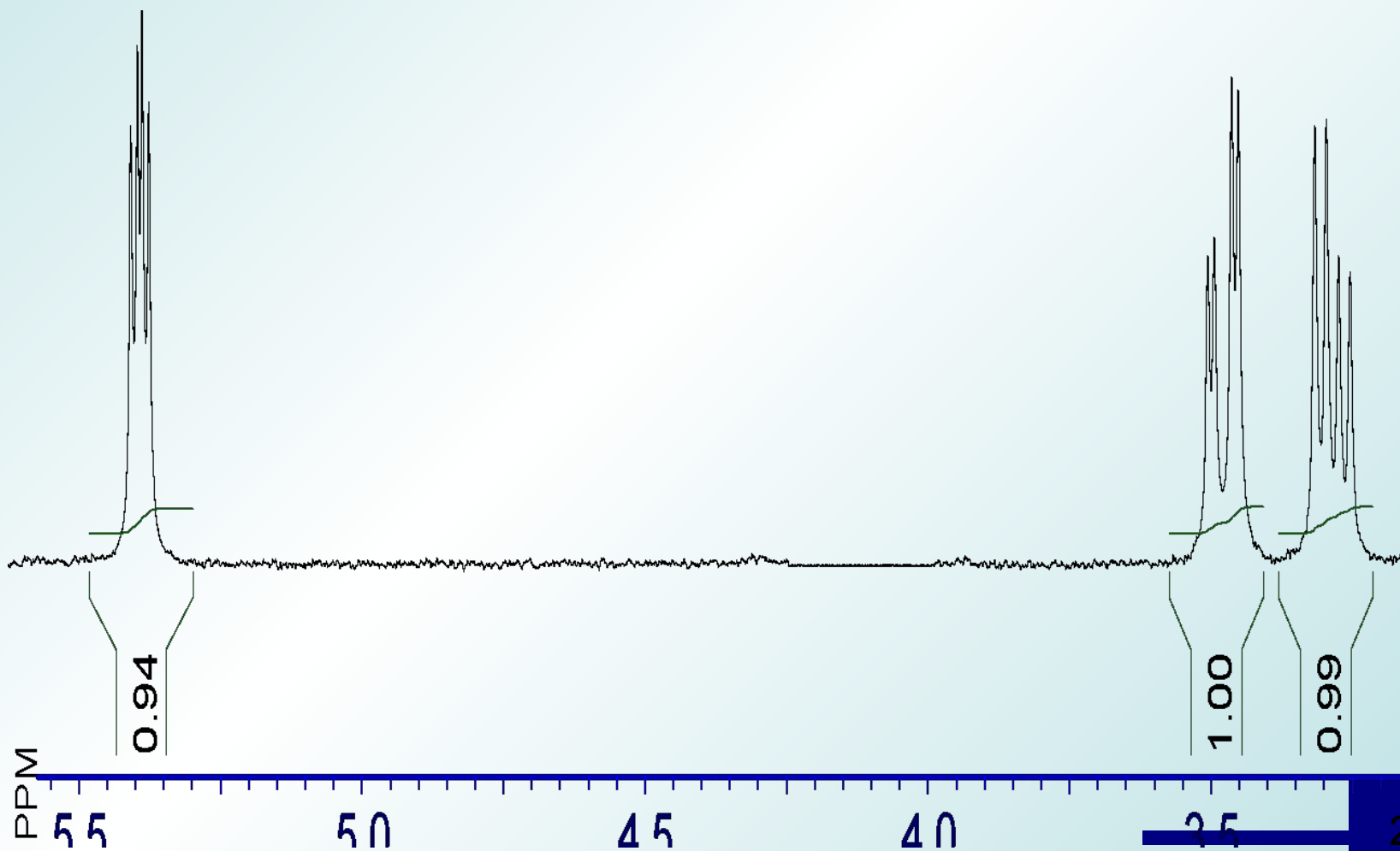
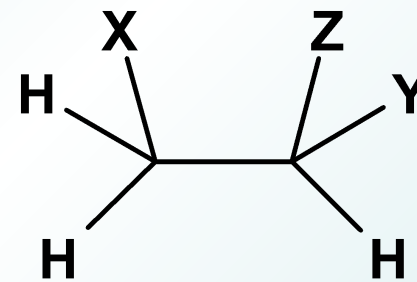






# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ

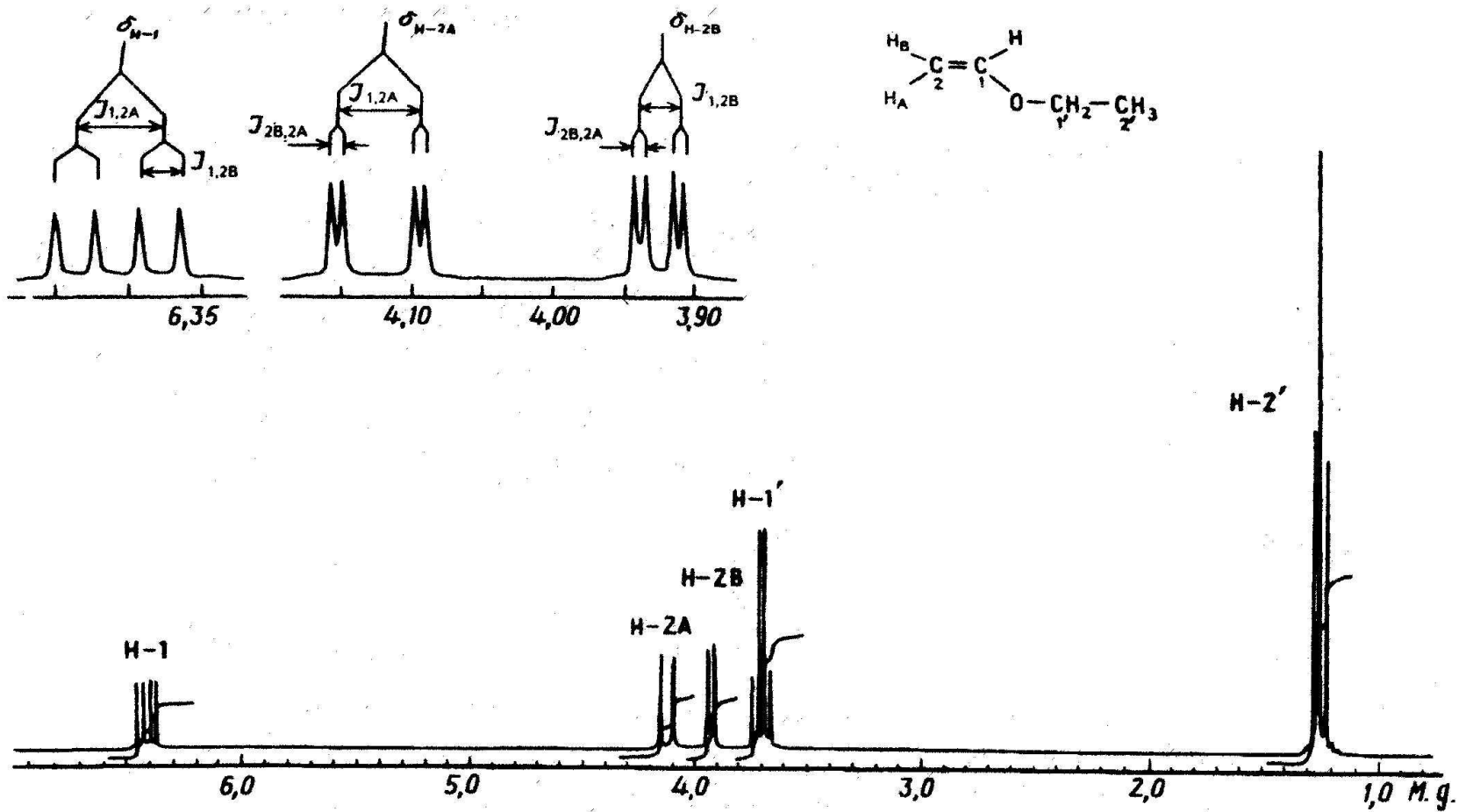
**ABX**



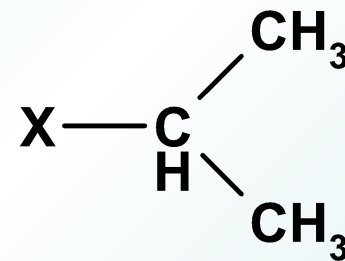


# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ

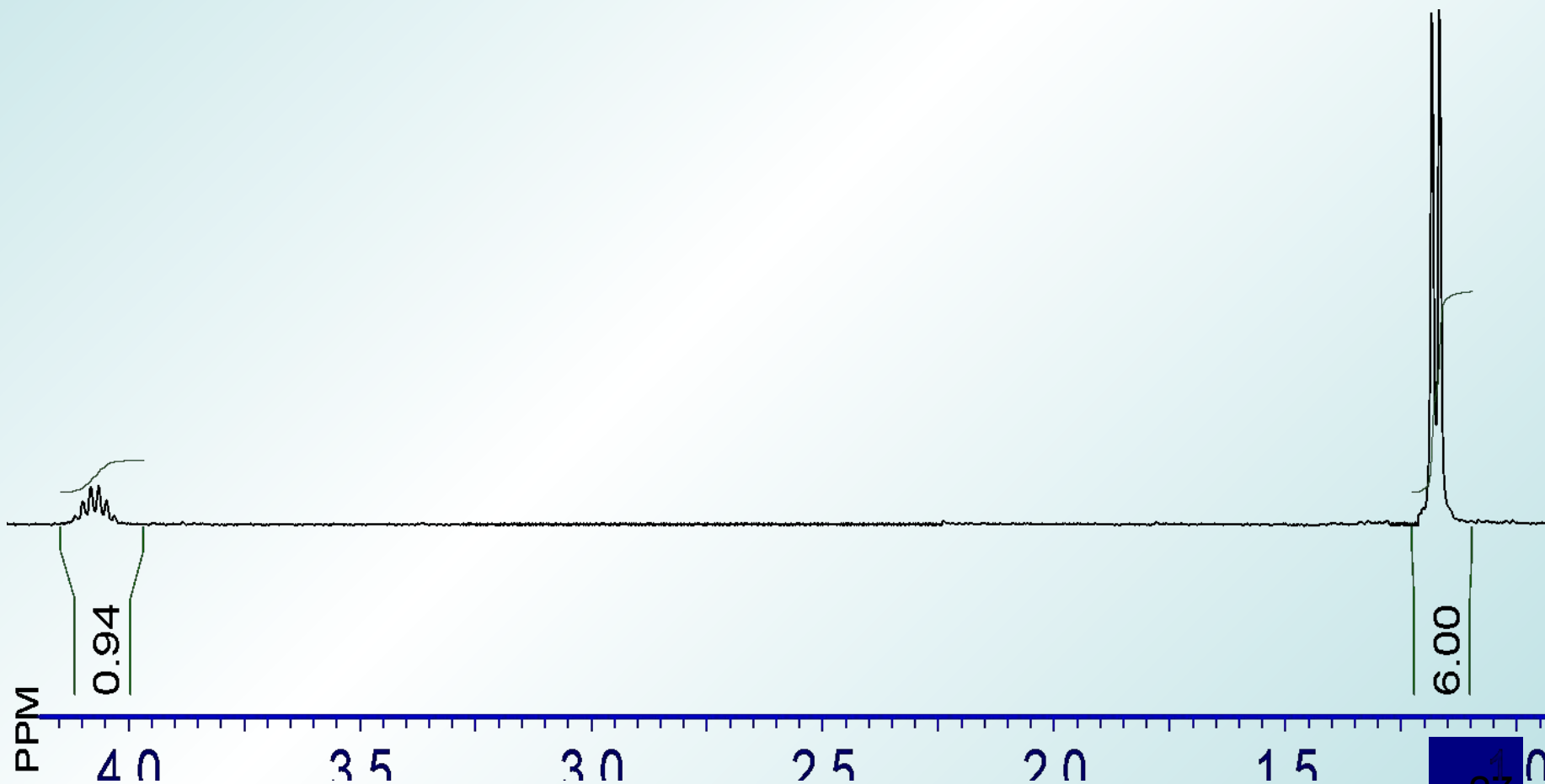
## ABX



# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ



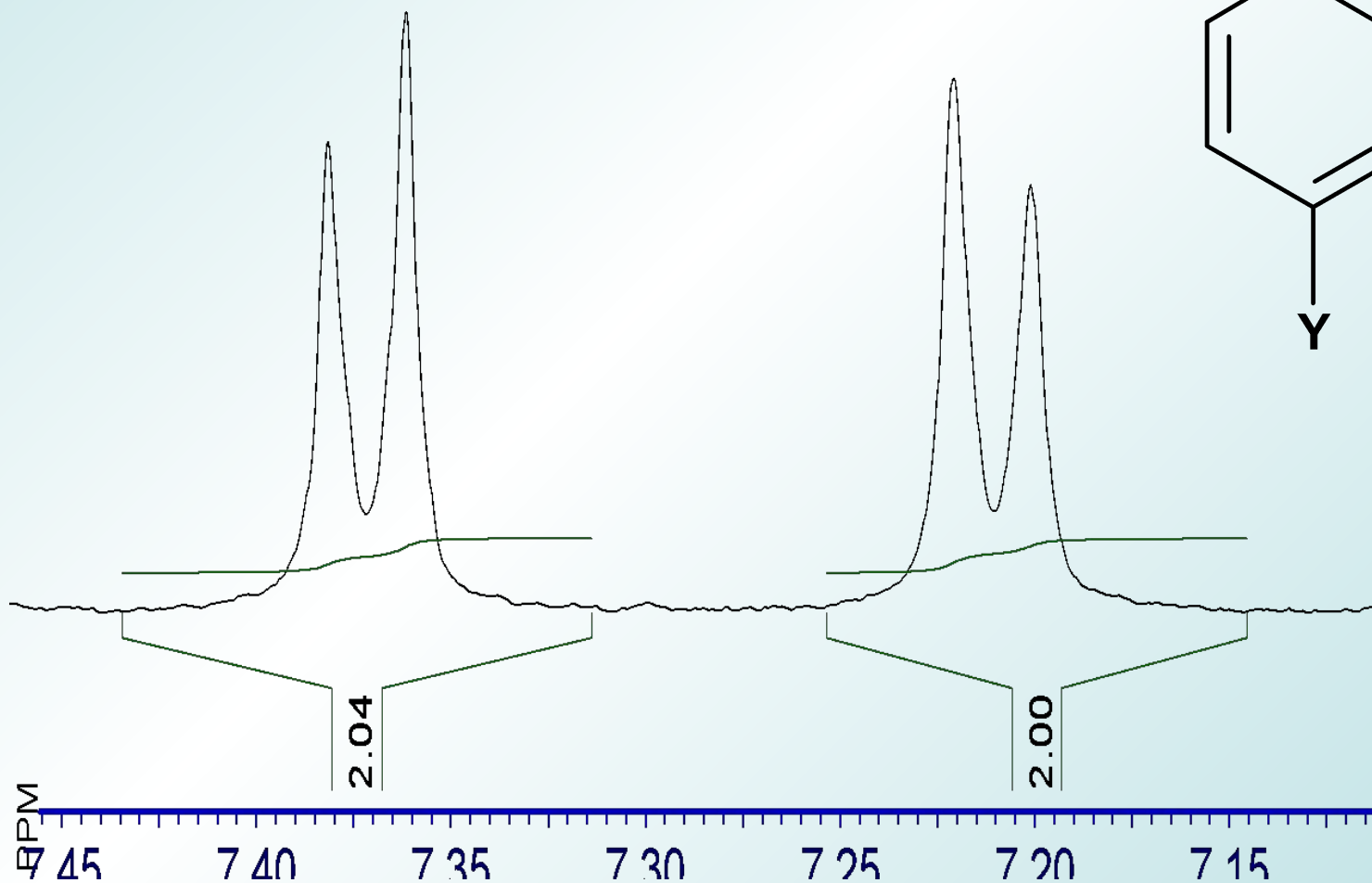
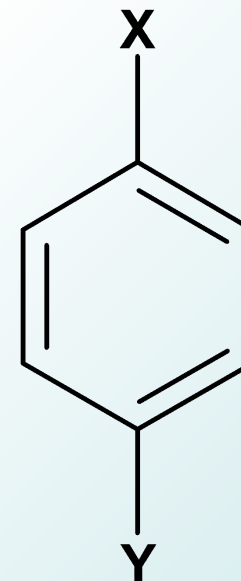
$A_6X$





# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ

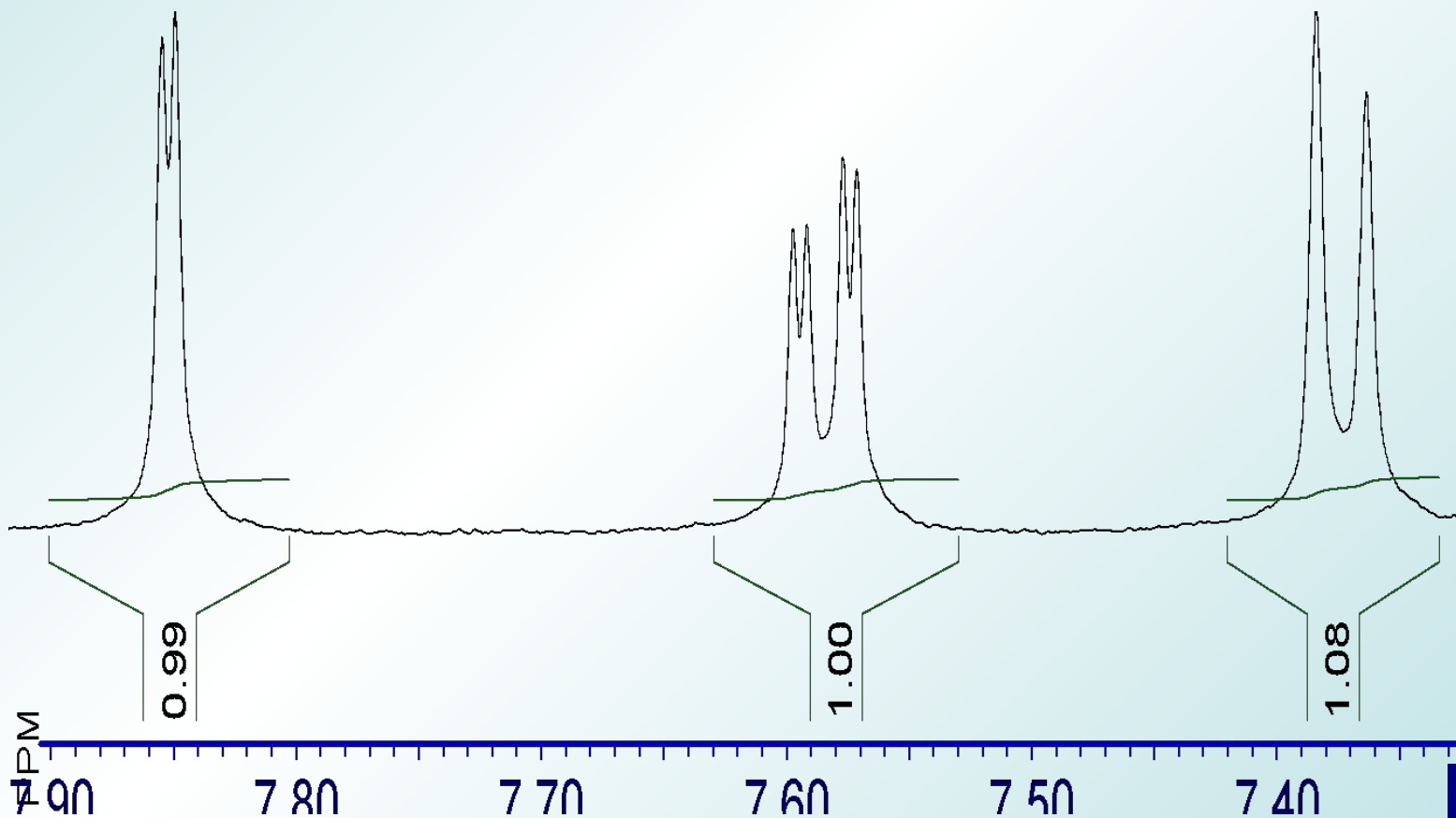
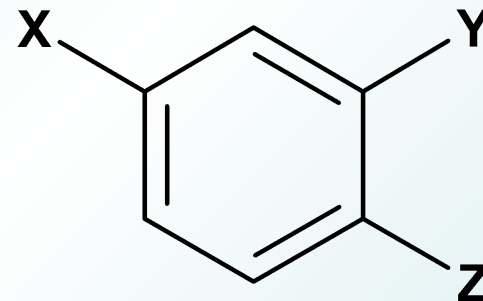
**AA'BB'**





# ТИПИ СПІНОВИХ СИСТЕМ

**AMX**

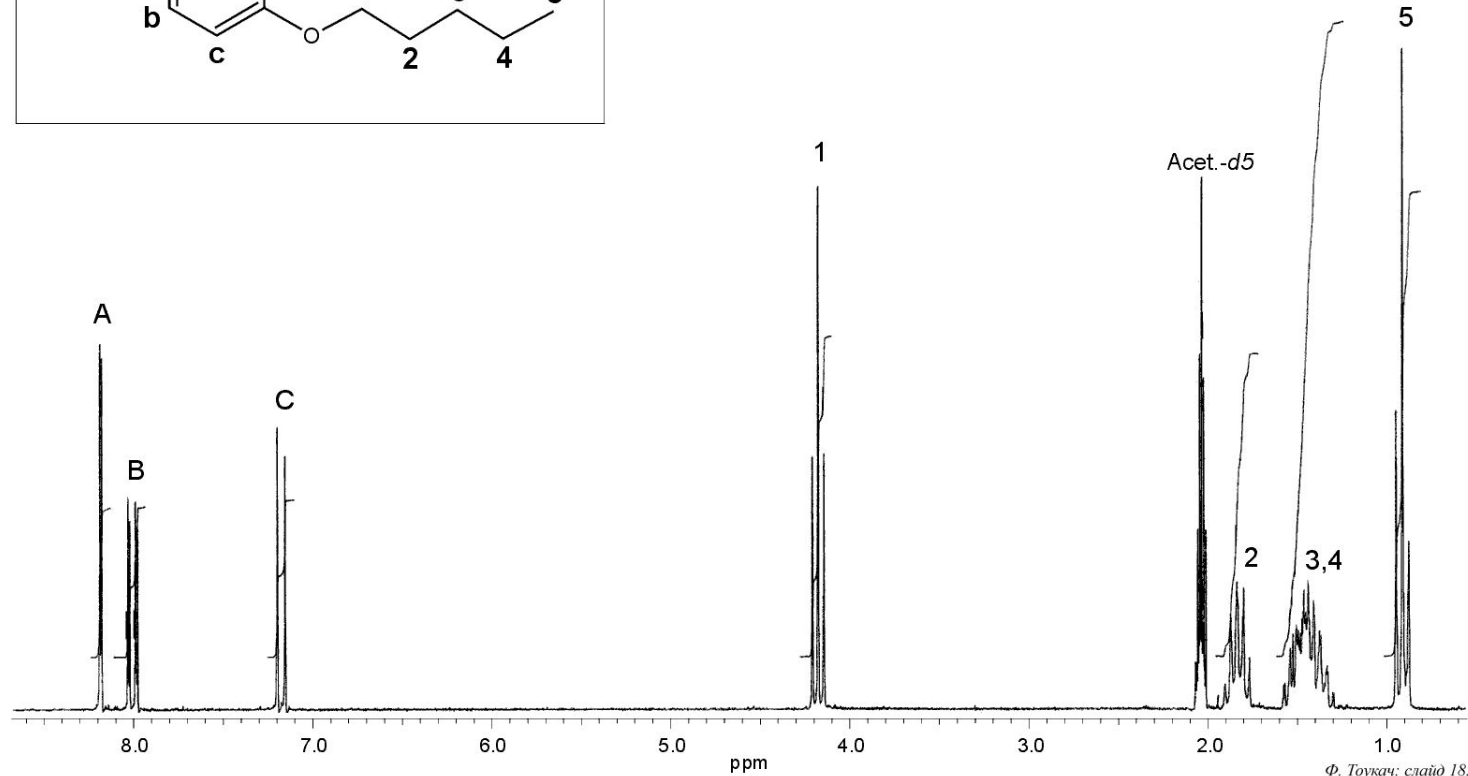
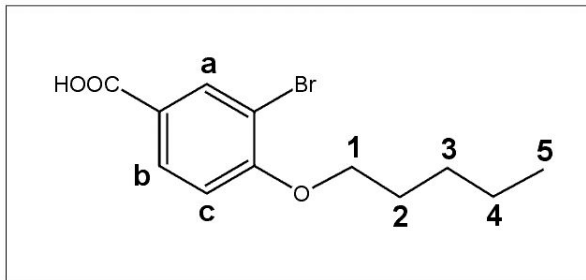




# АНАЛІЗ СПЕКТРУ ЗА ВСІМА ПАРАМЕТРАМИ – ПРЯМА СПЕКТРАЛЬНА ЗАДАЧА

ЯМР  $^1\text{H}$ , 200 МГц

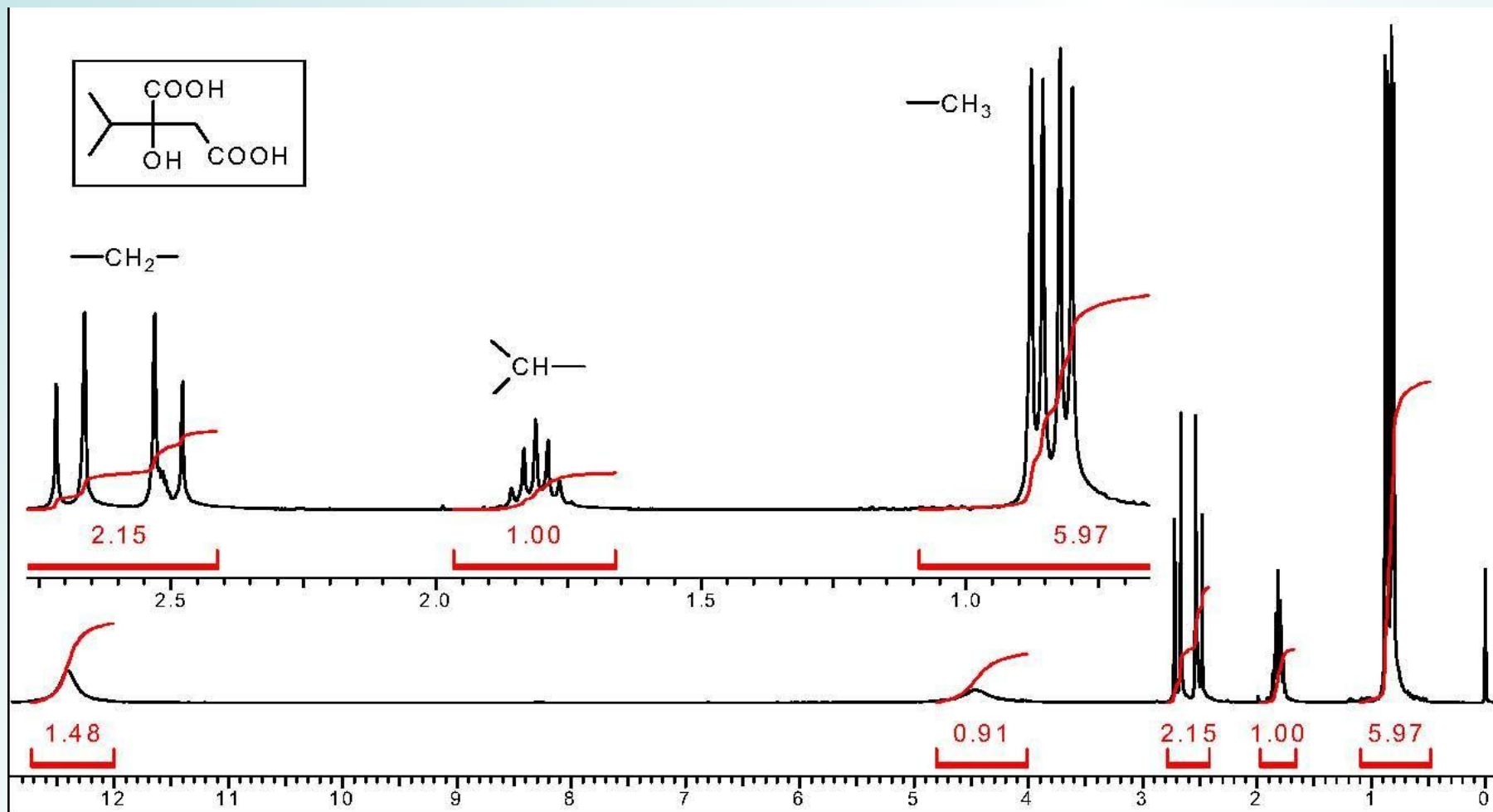
R #01



Ф. Тоукач: слайд 18.



# АНАЛІЗ СПЕКТРУ ЗА ВСІМА ПАРАМЕТРАМИ





# АНАЛІЗ СПЕКТРУ ЗА ВСІМА ПАРАМЕТРАМИ – ОБЕРНЕНА СПЕКТРАЛЬНА ЗАЛІЧКА

Аналіз хімічних зсувів та  
інтегральних інтенсивностей  
сигналів:

- сполука містить дві метильні групи;
- сполука містить дві метинові групи;
- наявні дві пари ароматичних протонів;
- є група -ОН (-COOH?);

Аналіз КССВ

- метильні групи зв'язані з СН;
- ароматичні протони зв'язані між собою;
- СН групи зв'язані між собою (?);

