

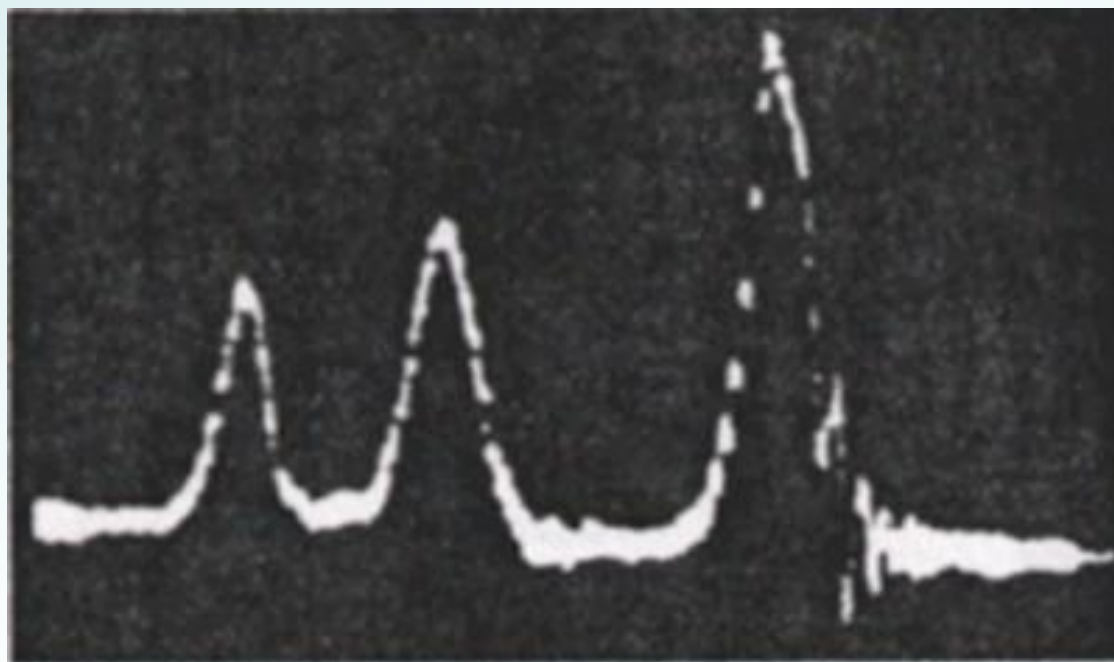


# СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР



## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР

-зумовлює розщеплення сигналів ЯМР в мультиплети



Один з перших  $^1\text{H}$ -ЯМР спектрів етанолу

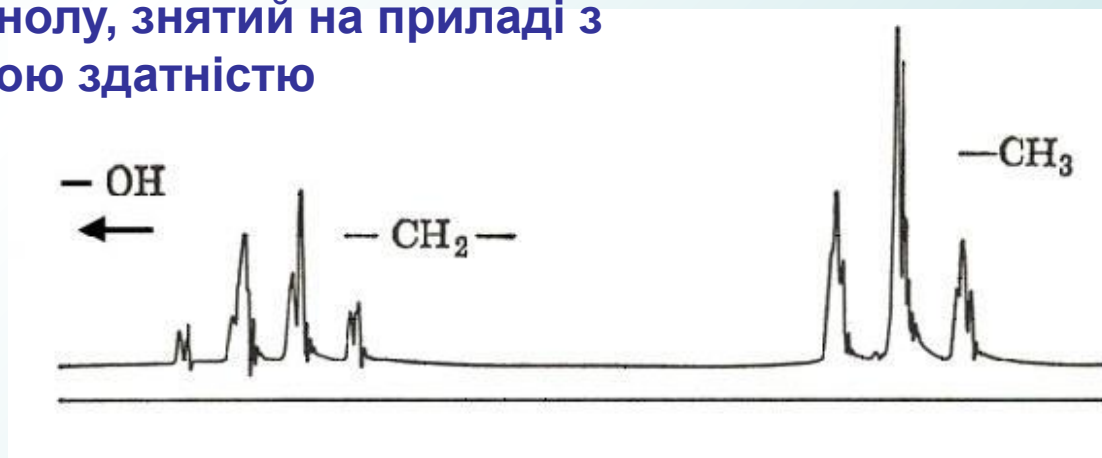


## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР

спектр  $^1\text{H}$ -ЯМР етанолу, знятий на приладі з **НИЗЬКОЮ** роздільною здатністю



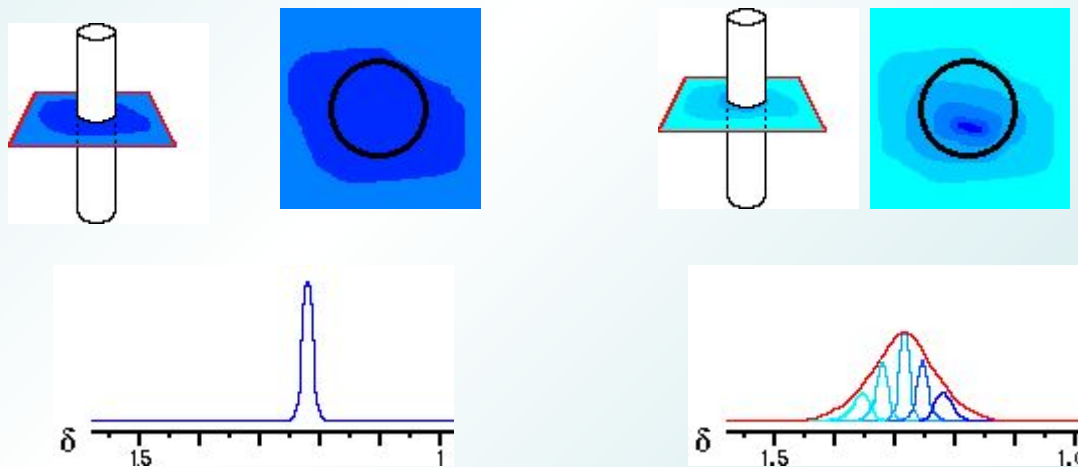
спектр  $^1\text{H}$ -ЯМР етанолу, знятий на приладі з **ВИСОКОЮ** роздільною здатністю





## РОЗДІЛЬНА ЗДАТНІСТЬ СПЕКТРОМЕТРІВ ЯМР

- характеризує можливість спостереження в спектрі ЯМР двох чи більше сигналів окремо
- експериментально визначається на спектрах еталонних зразків (у  $^1\text{H}$ -ЯМР спектроскопії – о-дихлорбензол)
- роздільна здатність спектрометрів ЯМР залежить, в першу чергу, від однорідності зовнішнього магнітного поля



однорідне поле-вузькі лінії-  
висока роздільна здатність

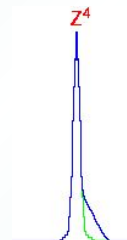
неоднорідне поле-широкі лінії-  
низька роздільна здатність



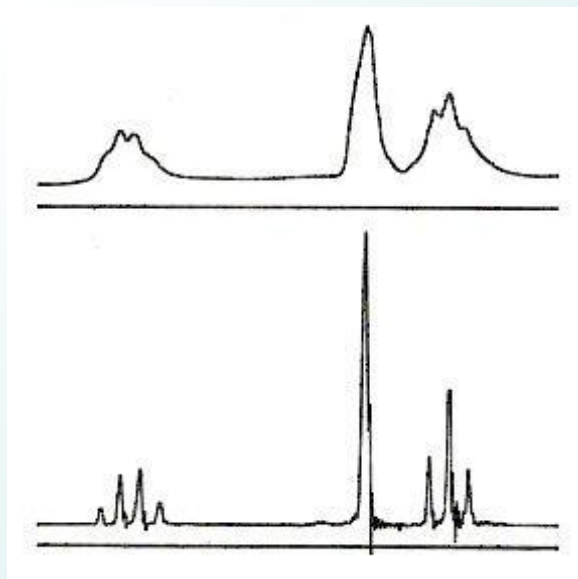
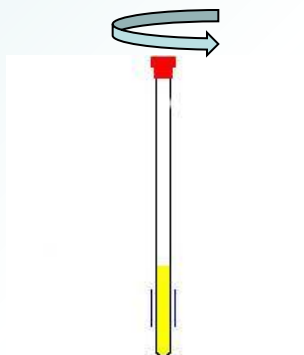
# РОЗДІЛЬНА ЗДАТНІСТЬ СПЕКТРОМЕТРІВ ЯМР

Спеціальні прийоми підвищення роздільної здатності:

- **шимування**



- **обертання зразка**



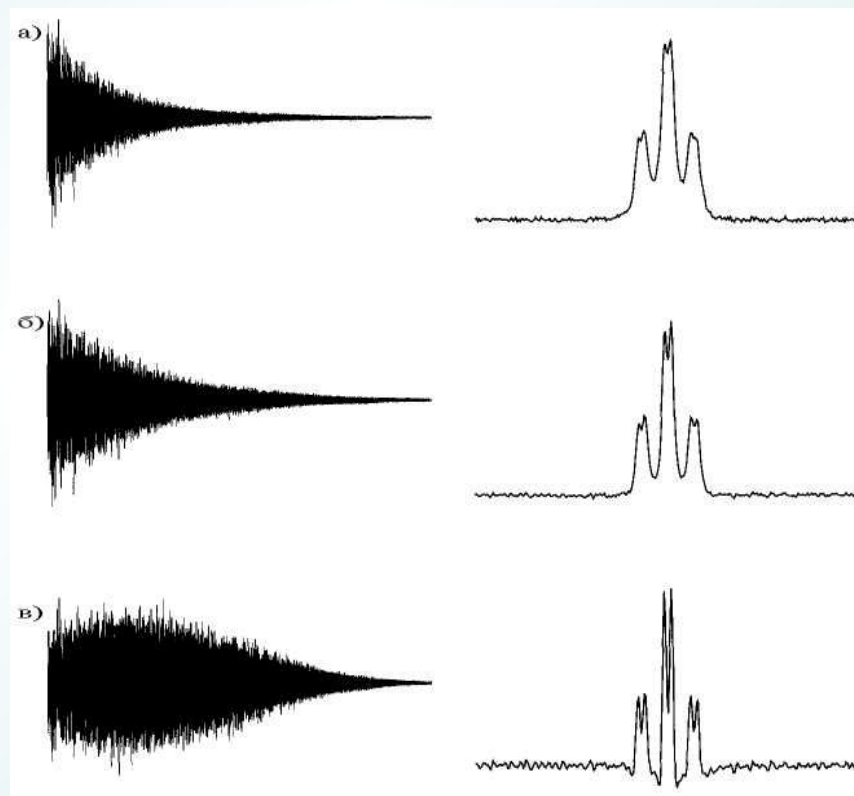
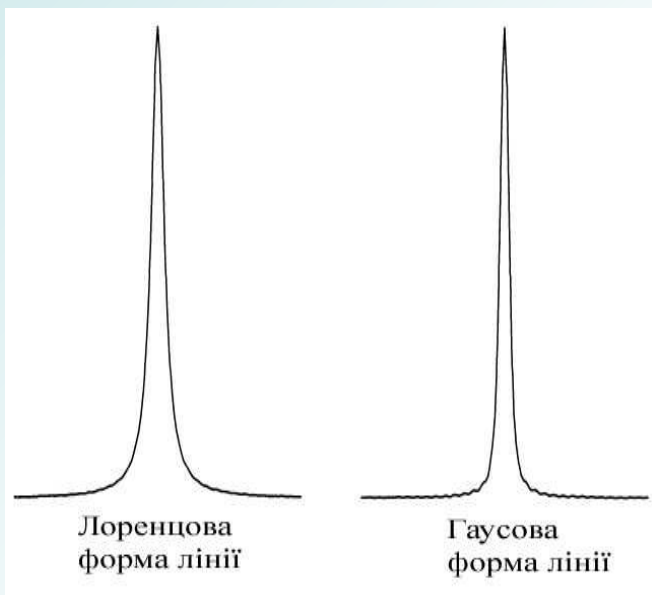
$^1\text{H}$ -ЯМР спектр метилетилкетону



## РОЗДІЛЬНА ЗДАТНІСТЬ СПЕКТРОМЕТРІВ ЯМР

Спеціальні прийоми підвищення роздільної здатності:

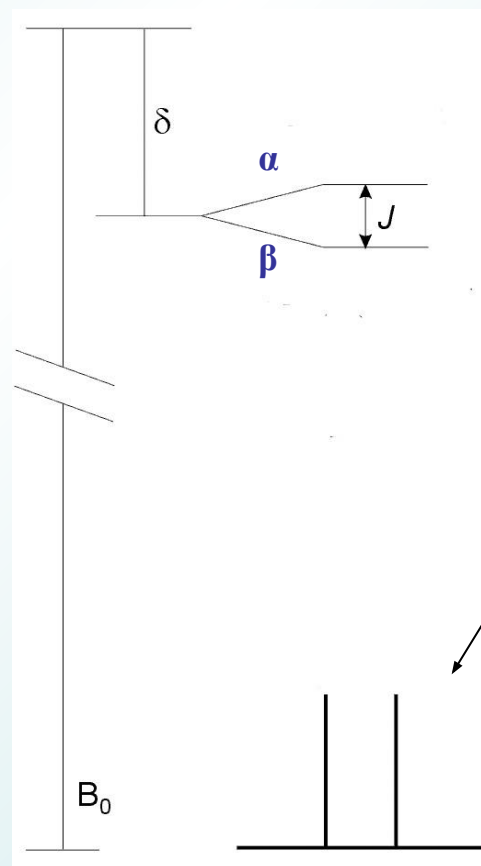
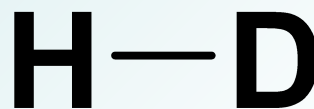
- Помноження кривої СВІ на функцію Гауса (аподизація)





## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР

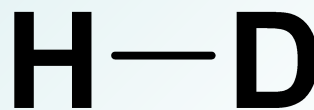
ядро зі спіном  $\frac{1}{2}$   
Два стани в маг-  
нітному полі:  $\alpha$  і  $\beta$



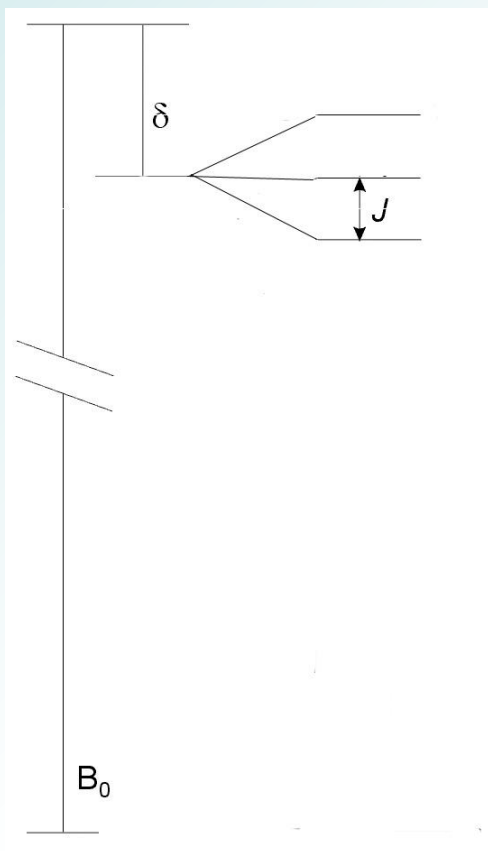
Сигнал у спектрі  
ЯМР на ядрах  
дейтерію (дублет)



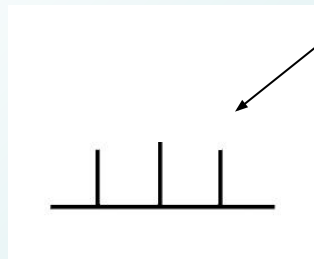
## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР



ядро зі спіном 1  
три стани в магнітному полі



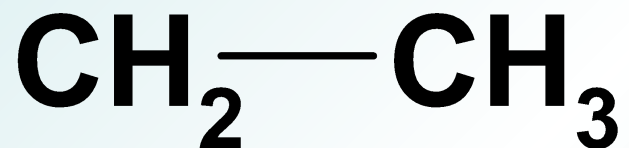
Сигнал у спектрі  
 $^1\text{H}$ -ЯМР  
(триплет)







## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР



Три різні значення сумарного спіну:

$\alpha\alpha$

$\alpha\beta, \beta\alpha$

$\beta\beta$



Триплет сигналу метильної групи

чотири різні значення сумарного спіну:

$\alpha\alpha\alpha$

$\alpha\alpha\beta, \alpha\beta\alpha, \beta\alpha\alpha$

$\beta\beta\alpha, \beta\alpha\beta, \alpha\beta\beta$

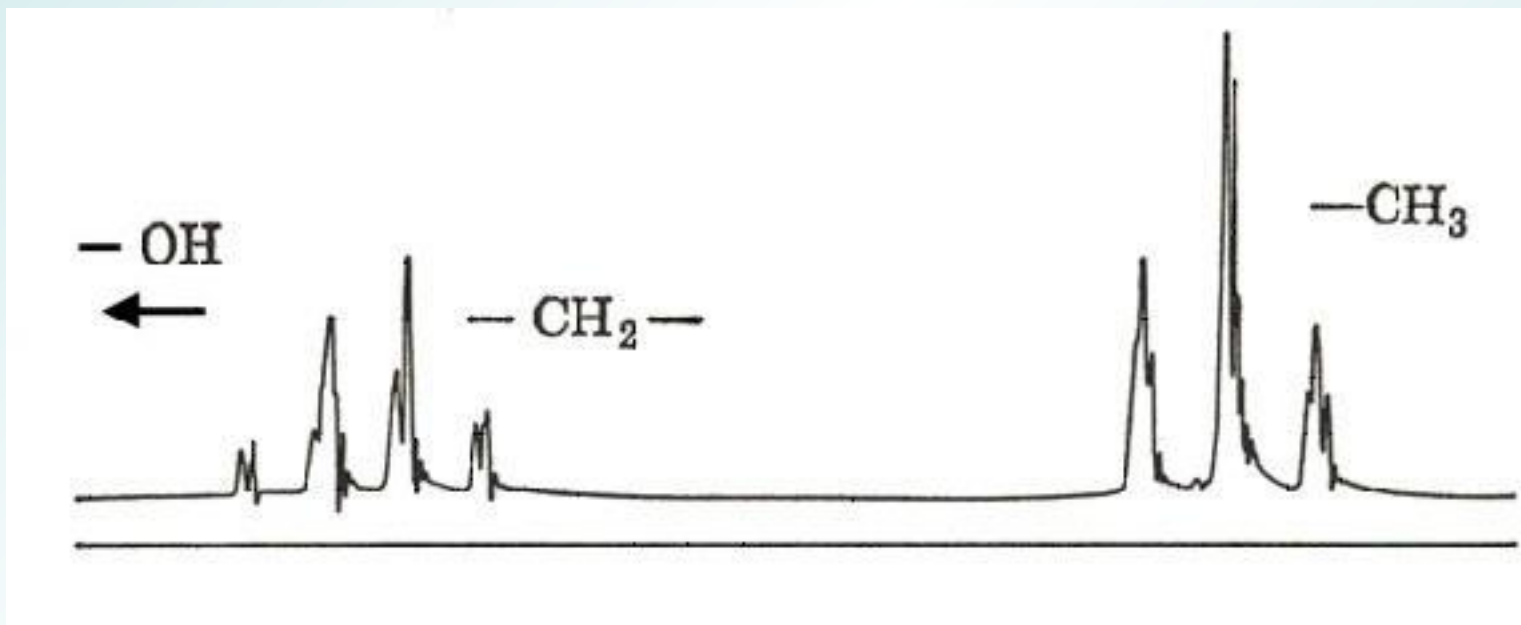
$\beta\beta\beta$



квартет сигналу метиленової групи



## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР





## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР

**кількість  
компонентів =  $2n/ + 1$   
в мультиплеті**

$n$  – кількість сусідніх ядер  
 $/$  - спін цих ядер

**Правило  
“( $n + 1$ )”  
діє для ядер  
зі спіном  $1/2$**



## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР

**Відносна інтенсивність компонентів в мультиплетах  
– трикутник Паскаля (для ядер зі спіном 1/2)**

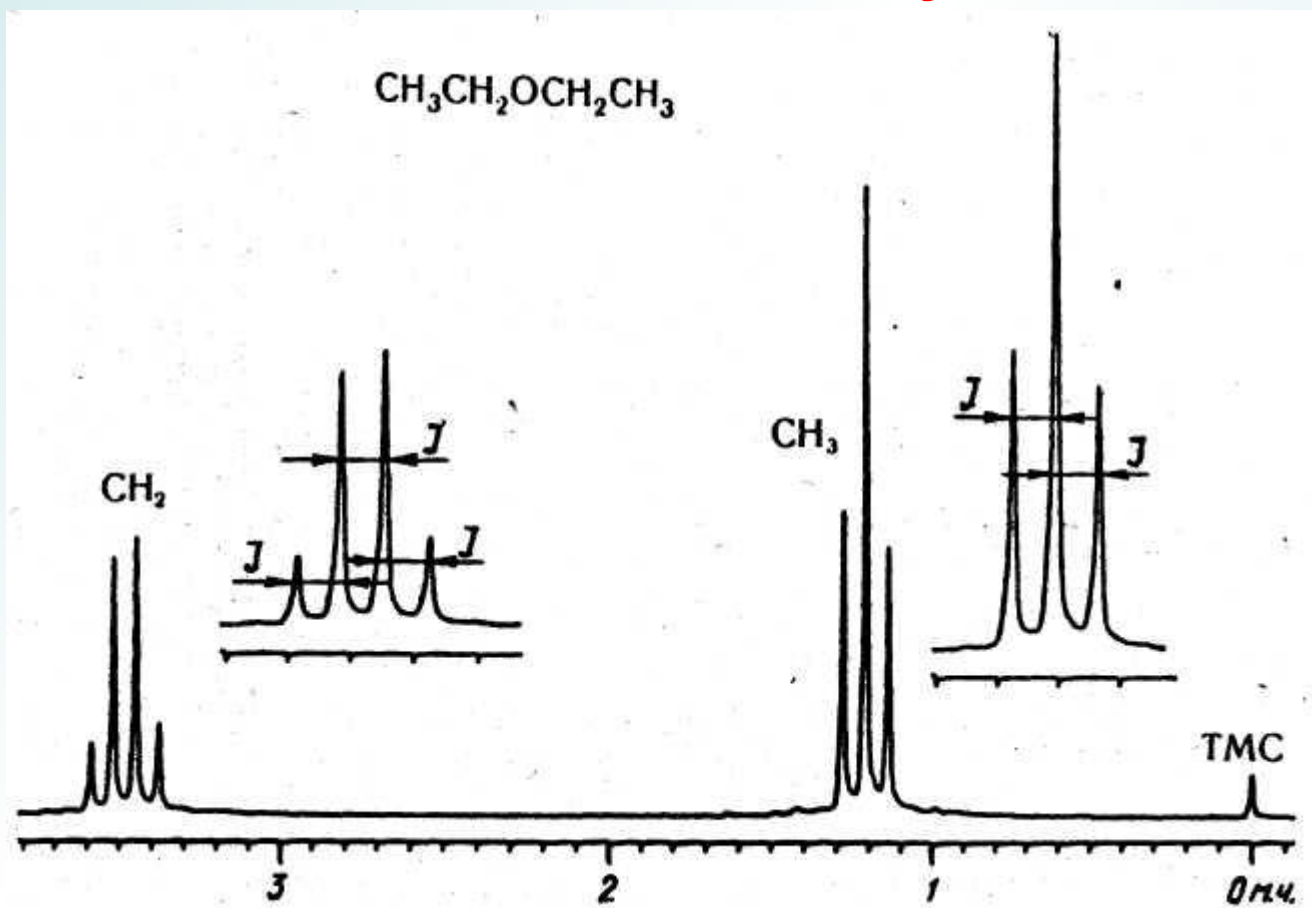
$n (l=1/2)$

0							1						
1							1	1					
2							1	2	1				
3							1	3	3	1			
4							1	4	6	4	1		
5							1	5	10	10	5	1	
6							1	6	15	20	15	6	1



## СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР

**константа спінової взаємодії  $J$  –  
відстань між компонентами мультиплетів в Гц**





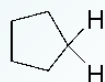
# КОНСТАНТИ СПІН-СПІНОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ (КССВ)

## ГЕМІНАЛЬНІ (<sup>2</sup>J)

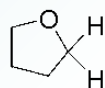
CH<sub>4</sub> -12.5

CH<sub>3</sub>Cl -10.8

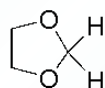
CH<sub>3</sub>F -9.6



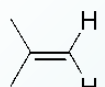
-14



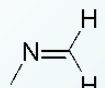
-8



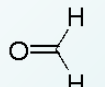
1



±3



10



42

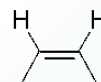
## ВІЦИНАЛЬНІ (<sup>3</sup>J)

H-C-C-H

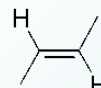
усереднена 6-9

*гош-* 2-7

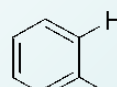
*транс-* 5-14



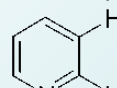
6-8



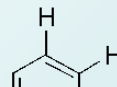
10-19



7-8

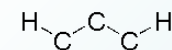


5-6

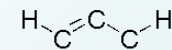


7-8

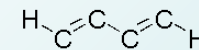
## ДАЛЬНІ (<sup>4</sup>J)



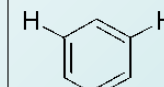
0-3



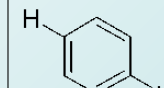
-2



1.3



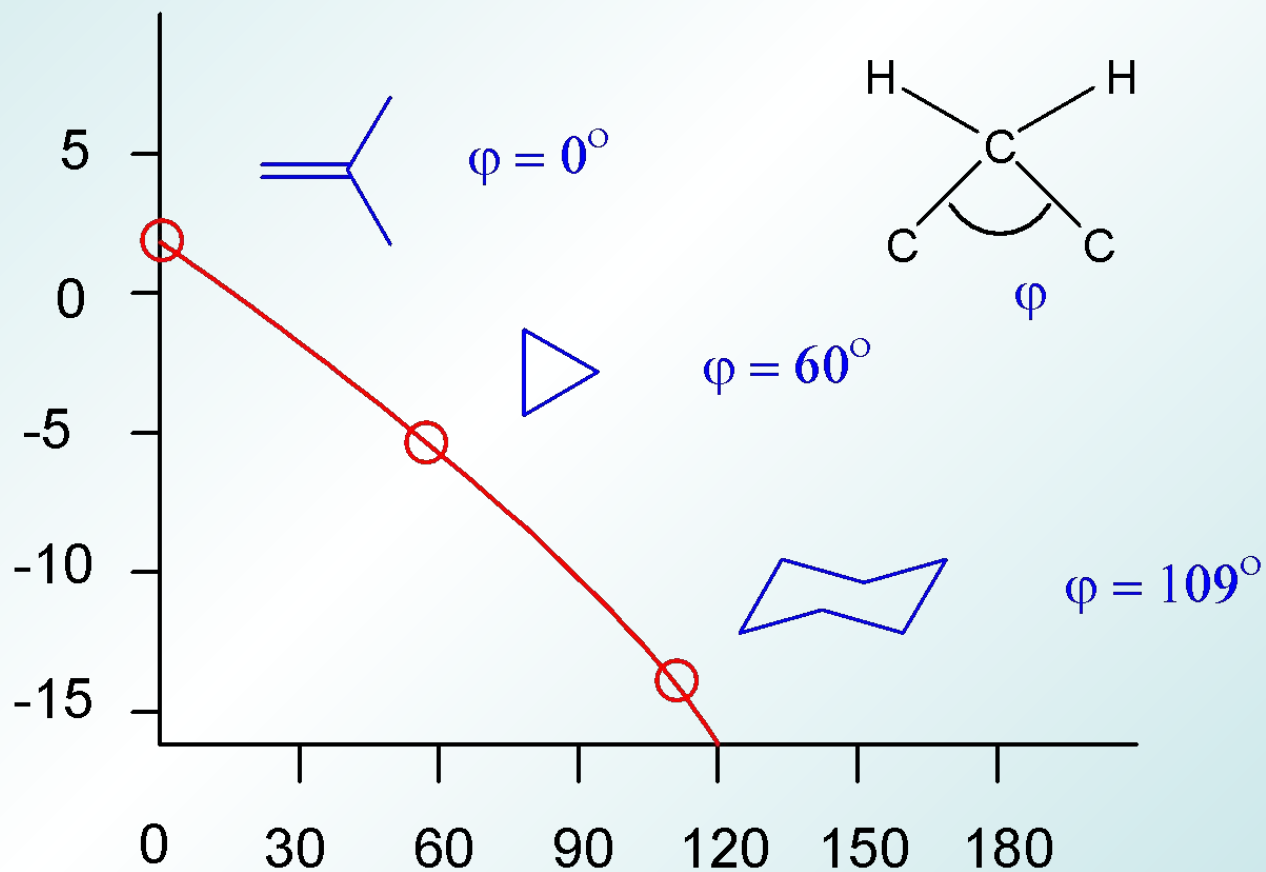
1-3



0-1.5

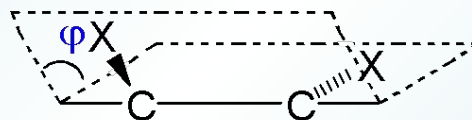
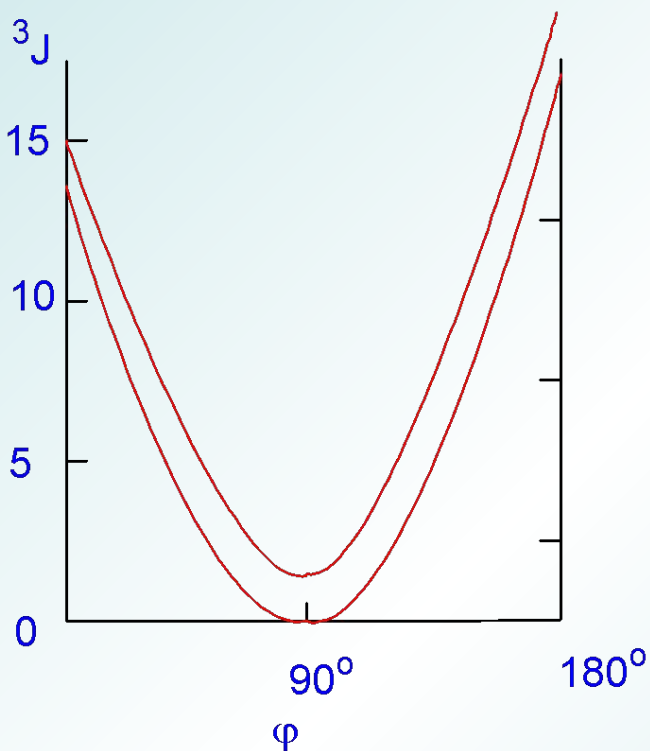


# ЗАЛЕЖНІСТЬ ГЕМІНАЛЬНОЇ КССВ ВІД КУТА МІЖ ЗВ'ЯЗКАМИ





## ЗАЛЕЖНІСТЬ ВІЦИНАЛЬНОЇ КССВ ВІД ДІЕДРАЛЬНОГО КУТА



$$^3J_{\text{H-H}} = A + B \cos \phi + C \cos 2\phi$$

Для вуглеводнів  $A = 7$  Гц,  
 $B = -1$  Гц,  $C = -5$  Гц





# СПІН-СПІНОВА ВЗАЄМОДІЯ В СПЕКТРАХ ЯМР

