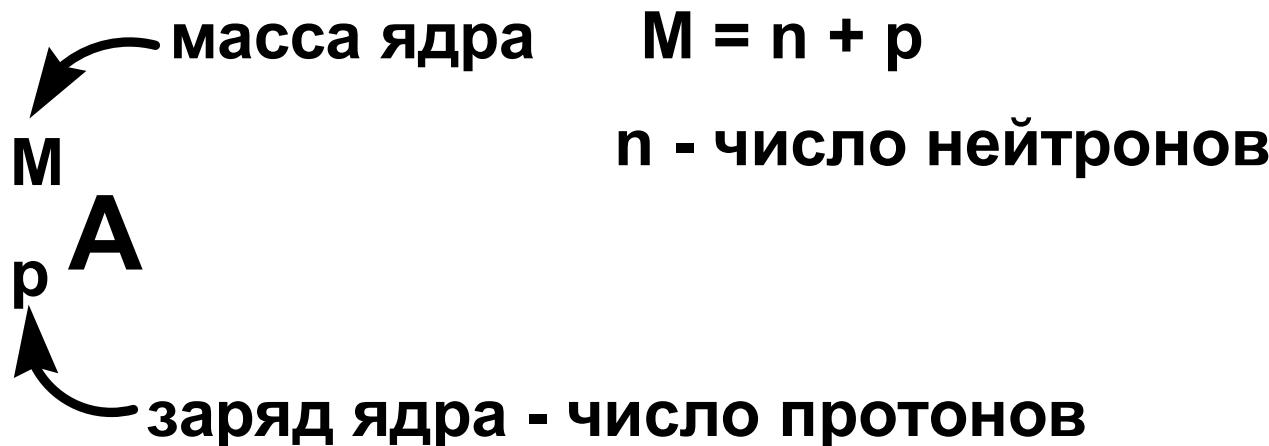


ЯДЕРНЫЙ МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС

ЯМР

Магнитные свойства ядер



$^{13}_6 \text{C}$ изотоп углерода
с массой 13

$^1_1 \text{H}$ изотоп водорода
с массой 1 - протий

Ядра имеют
спиновое
квантовое число I
(спин ядра).

M – масса ядра – нечётная	M – масса ядра – чётная	
n – нечётное p – чётное или n – чётное p – нечётное Нечётно-чётные ядра	n – нечётное p – нечётное Нечётно-нечётные ядра	n – чётное p – чётное Чётно-чётные ядра
спин ядра $I = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ (полуцелое)	спин ядра $I = 1, 2, 3, \dots$ (целое)	спин ядра $I = 0$

$I = 1/2$: ^1H , ^{13}C ,
 ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P

$I = 3/2$: ^{11}B

$I = 5/2$: ^{17}O

$I = 1$: ^2H (D), ^{14}N

$I = 3$: ^{10}B

^{12}C , ^{16}O , ^{32}S

Возможно наблюдение явления ЯМР.

Невозможно
наблюдение
явления ЯМР.

Явление ЯМР можно наблюдать только для ядер с ненулевым спиновым квантовым числом $I \neq 0$.

Ядра с $I \neq 0$ имеют магнитное квантовое число $m_i = I, I-1, I-2, \dots, -I$ (значения от I до $-I$ через 1).

Ядро атома водорода ^1H (протон):

$I = 1/2$ и $m_i = 1/2, -1/2$.

Ядро дейтерия ^2H (D): $I = 1$ и $m_i = 1, 0, -1$.

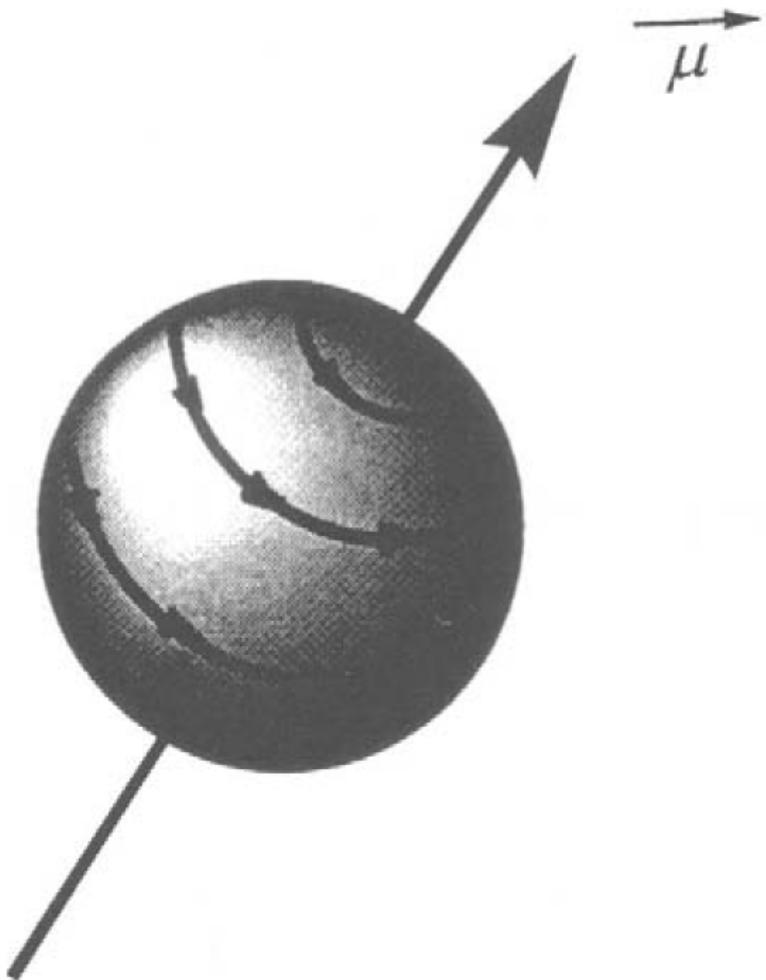
Ядра атомов имеют собственный момент импульса p :

$$p = \sqrt{I(I + 1)} \times \frac{h}{2\pi} \quad \begin{array}{l} I - \text{спин ядра} \\ h - \text{постоянная Планка} \end{array}$$

Магнитные ядра ($I \neq 0$) характеризуются магнитным моментом μ :

$$\mu = \gamma \times p \quad \begin{array}{l} \gamma - \text{гиромагнитное отношение} - \\ \text{индивидуальная характеристика ядра} \end{array}$$

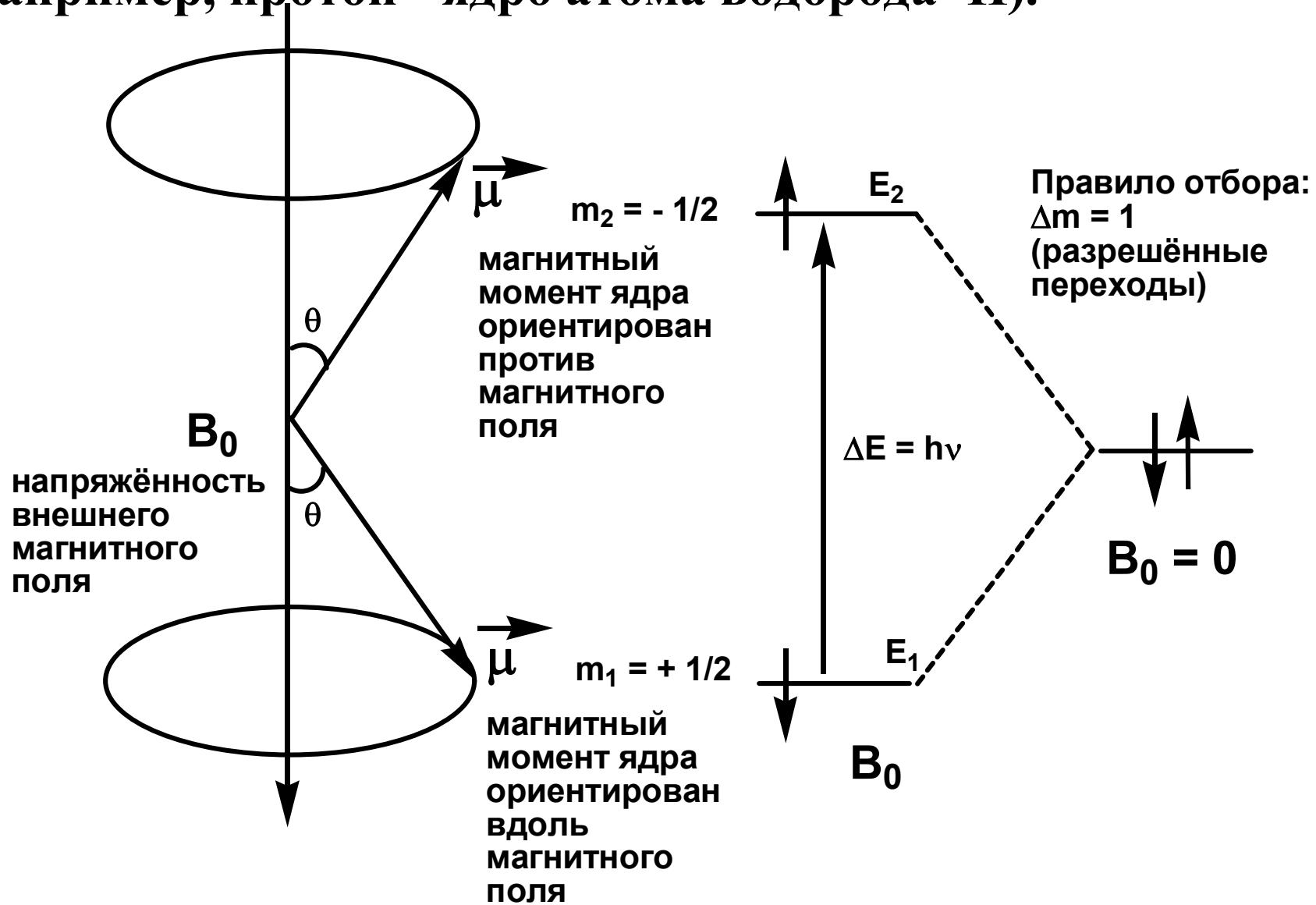
m_i – это проекция вектора μ на линии напряженности магнитного поля.



**Магнитное ядро со спином I ,
имеющее магнитный момент μ .**

Ядро в магнитном поле. Явление ЯМР

Атомное ядро со спином $I = 1/2$ и $m_i = +1/2$ (α), $-1/2$ (β)
(например, протон - ядро атома водорода ${}^1\text{H}$).



Энергия ядра в магнитном поле:

$$E = -\frac{m}{2\pi} \gamma B_0$$

B_0 – напряженность
магнитного поля

для $m_1 = +1/2$ $E_1 = -\frac{h}{4\pi} \gamma B_0$

для $m_2 = -1/2$ $E_2 = \frac{h}{4\pi} \gamma B_0$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{h}{2\pi} \gamma B_0$$

Основное уравнение ЯМР

$$\Delta E = \frac{h}{2\pi} \gamma B_0 \quad \Delta E = h\nu$$

$$\nu = \frac{\gamma B_0}{2\pi}$$

B₀ – напряженность магнитного поля
ν – резонансная частота
h – постоянная Планка
γ – гиromагнитное отношение

Для ядер ¹H: γ = 2.674 × 10⁸ с⁻¹ Тл⁻¹,
при B₀ = 1.4 Тл ν = 60 МГц (резонанс).

Разница заселенностей уровней с $m_1 = +1/2$ (α) и $m_2 = -1/2$ (β)

По закону температурного распределения Больцмана:

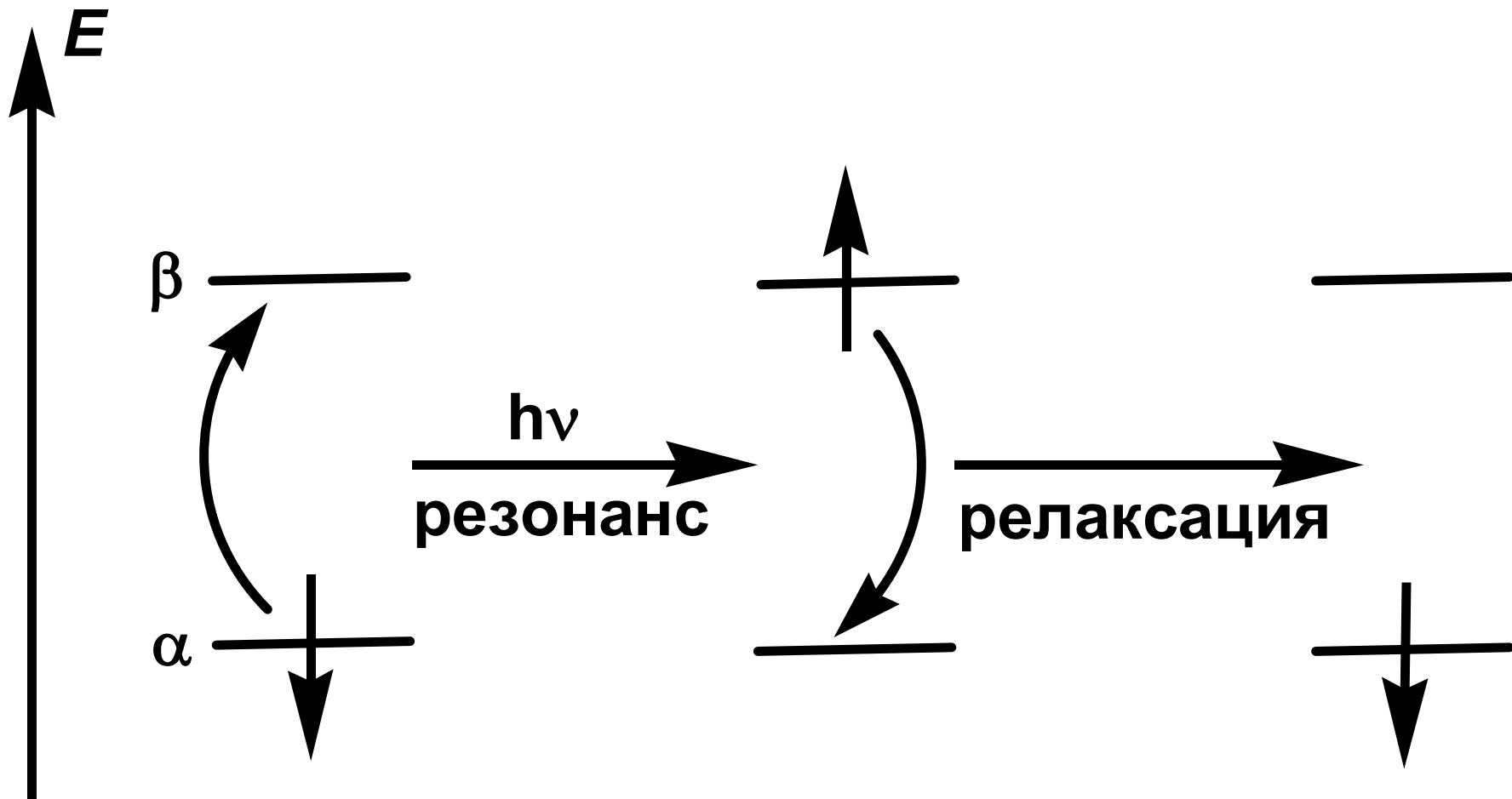
$$\frac{N_\beta}{N_\alpha} = e^{-\frac{\Delta E N_{\text{ав}}}{RT}} = e^{-\frac{hVN_{\text{ав}}}{RT}} = e^{-\frac{h\gamma B_0 N_{\text{ав}}}{2\pi RT}}$$

Для ядер ^1H при $T = 300\text{K}$ (23°C): $\frac{N_\beta}{N_\alpha} = 0.99999$
 $\gamma = 2.674 \times 10^8 \text{ c}^{-1}\text{Tл}^{-1}$, $B_0 = 1.4 \text{ Тл}$

$$\frac{N_\alpha}{N_\beta} = 1.00001$$

Из 2 000 010 ядер:
1 000 000 с $m_2 = -1/2$ (β) и
1 000 010 с $m_1 = 1/2$ (α),
т.е. разница заселённости $10^{-3}\%$.

Релаксация – возвращение системы ядерных спинов в исходное состояние после резонанса

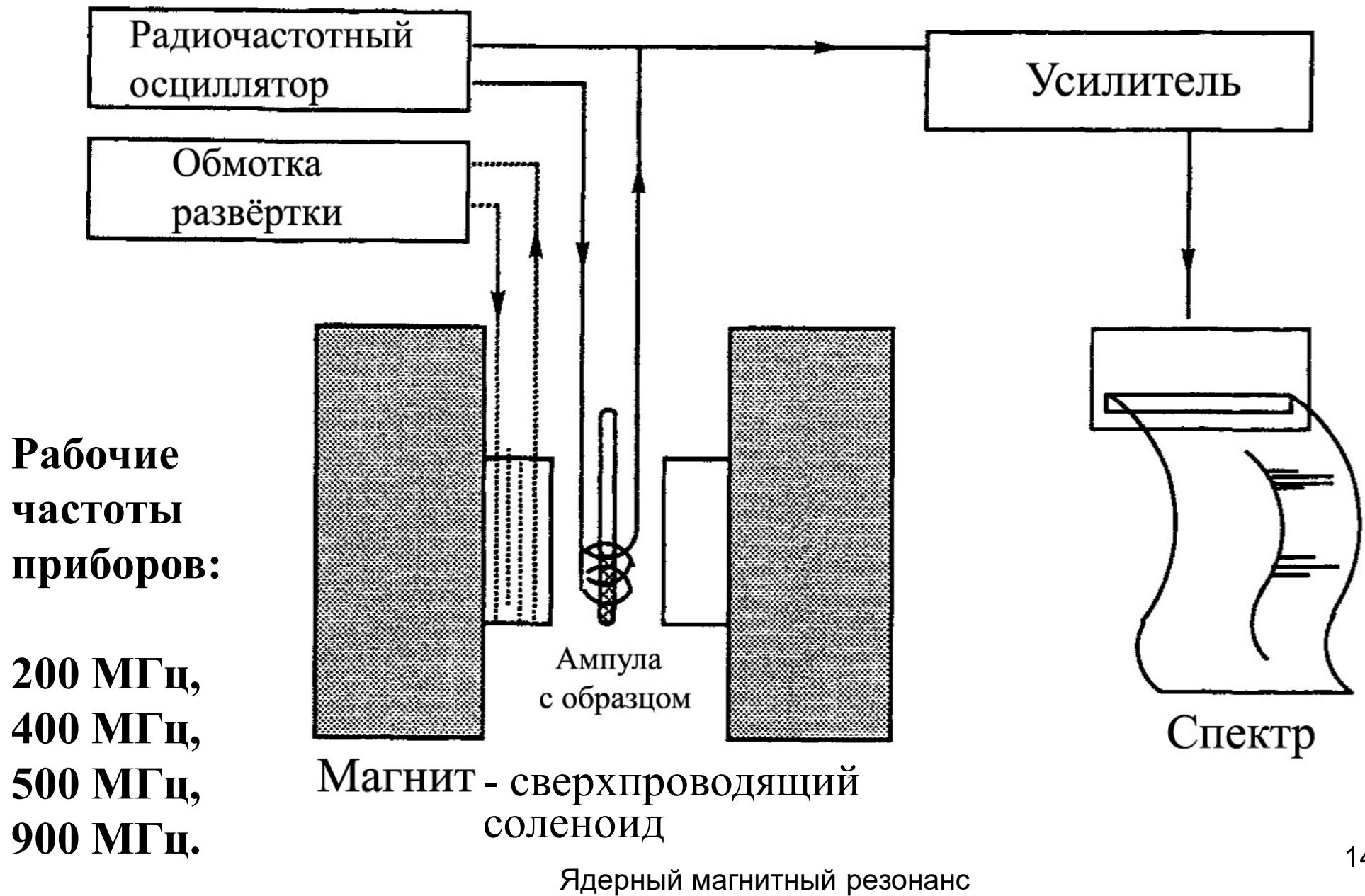


Механизмы релаксации

- 1. Спин-решёточная релаксация (продольная).**
Характеризуется временем T_1 . Передача магнитной энергии межмолекулярному окружению. Превращение магнитной энергии в тепловую.

- 2. Спин-спиновая релаксация (поперечная).**
Характеризуется временем T_2 . Обмен спинами между соседними ядрами.

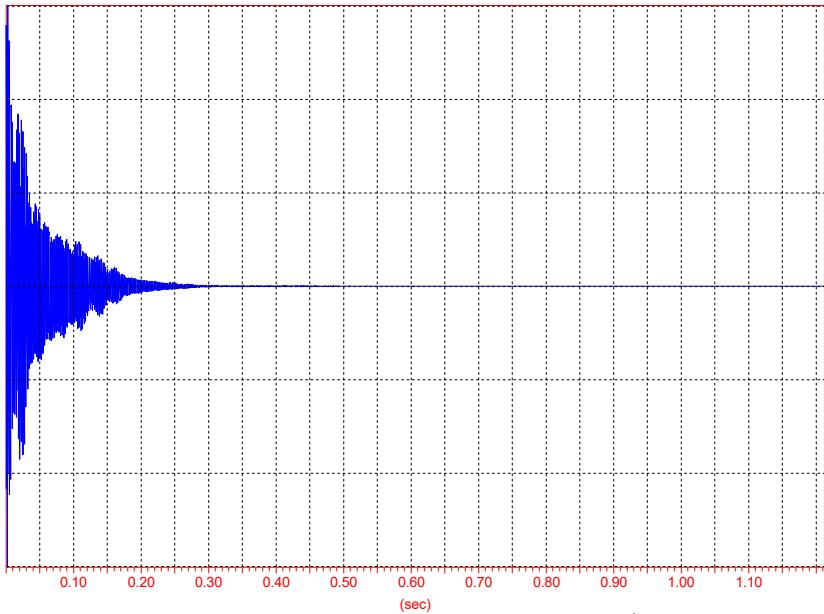
Принципиальная блок-схема спектрометра ЯМР



ЯМР с Фурье-преобразованием

Образцы подвергаются действию мощного кратковременного импульса (50 пикосекунд) с широким диапазоном частот. При этом резонируют все ядра образца.

Регистрируют сигнал по всем частотам. После математической операции Фурье-преобразования получают спектр ЯМР.

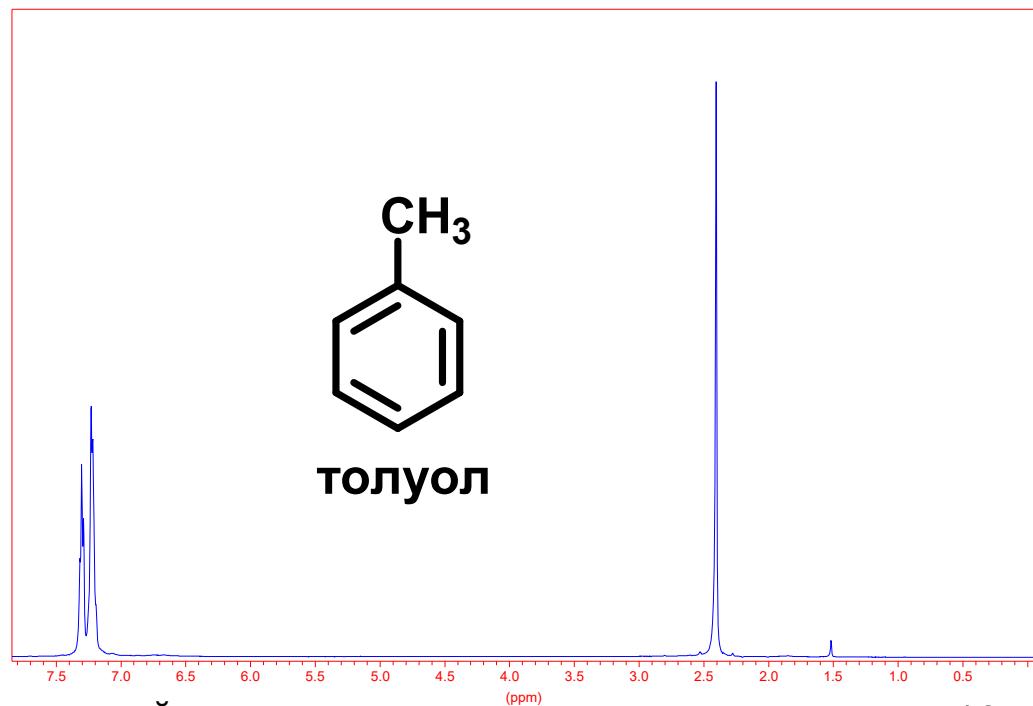


**Сигнал спада
свободной индукции –
все частоты**

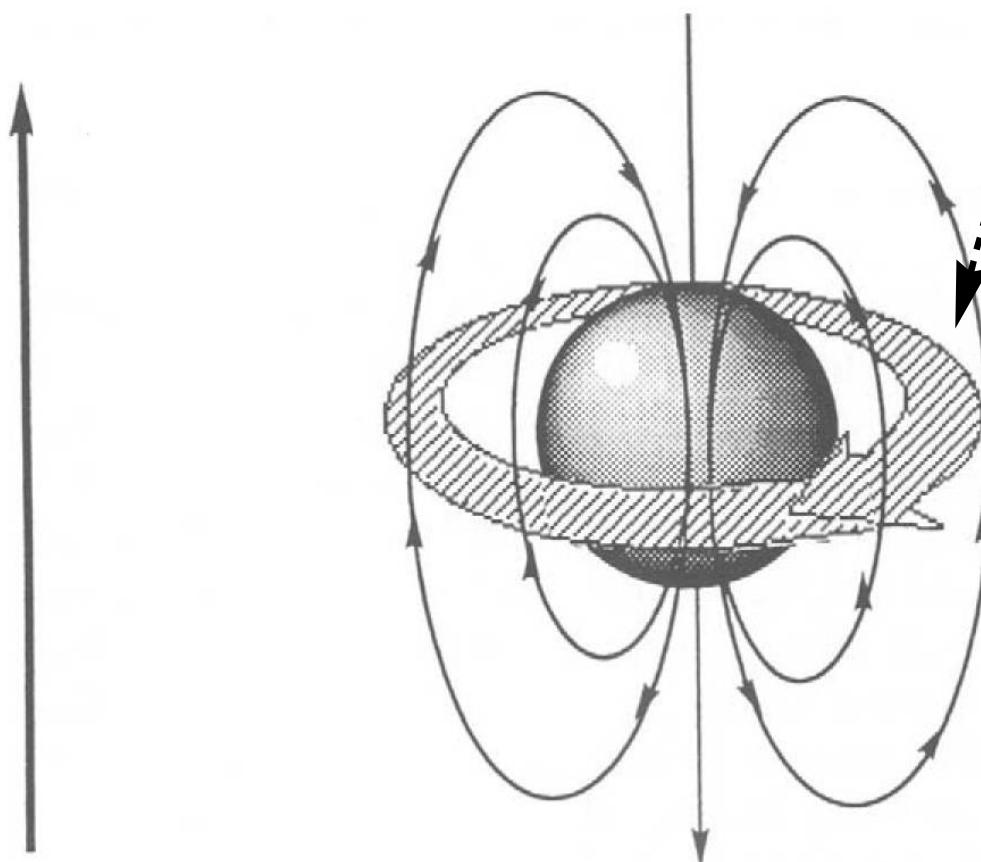
**Фурье-
преобразование**

**Спектр ЯМР ^1H
– распределение
по частотам**

Ядерный магнитный резонанс



Химический сдвиг



B_0 - внешнее
магнитное поле

магнитное поле $b = \sigma B_0$,
индуцированное
током i

i - ток электронов,
индуцированный
полем B_0

**Локальное магнитное
поле на ядре:**

$$B_{\text{лок.}} = B_0 - \sigma B_0 = B_0(1-\sigma)$$

**σ – константа
экранирования
ядра электронами.**

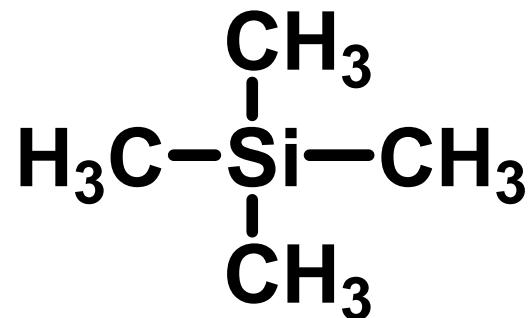
**Каждое ядро имеет свою константу σ
и свою резонансную частоту:**

$$\nu_{\text{рез.}} = \frac{\gamma B_{\text{лок.}}}{2\pi} = \frac{\gamma B_0(1 - \sigma)}{2\pi}$$

**От $\nu_{\text{рез.}}$ перешли к измерению величин, называемых
химическими сдвигами δ и измеряемых в миллионных
долях :**

$$\delta = \frac{\nu_{\text{рез. образца}} - \nu_{\text{рез. стандарта}}}{\nu_{\text{раб. прибора}}} \times 10^6 \text{ млн. д.}$$

В спектроскопии ЯМР ^1H и ^{13}C в качестве стандартов используют сигналы протонов и ядер углерода, соответственно, молекулы тетраметилсилана $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ (ТМС) для которого $\delta = 0$ м. д.

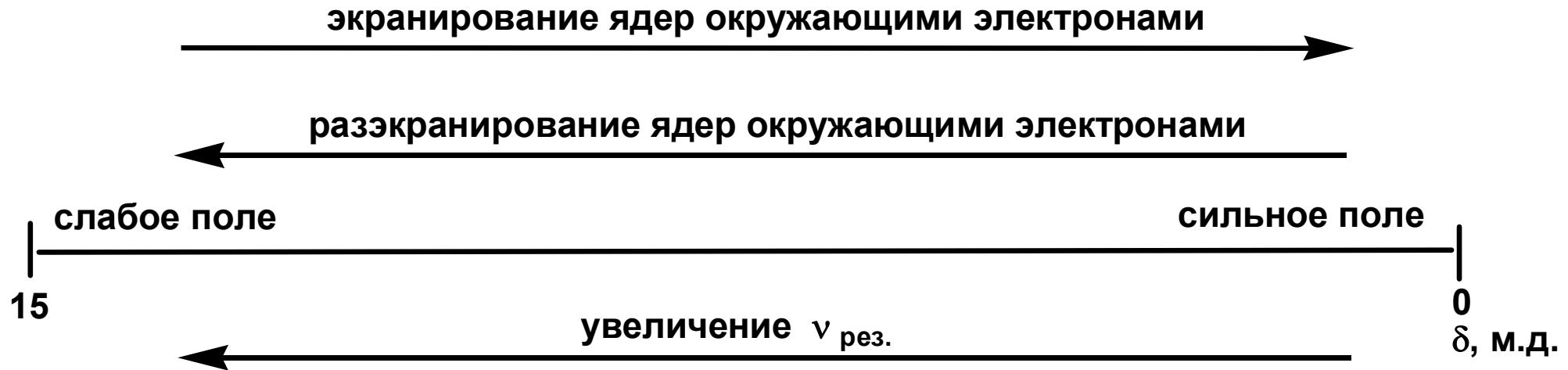


тетраметилсилан

$$\delta = 0 \text{ м.д.}$$

Спектроскопия ЯМР на ядрах ^1H – протонный магнитный резонанс (ПМР)

Шкала химических сдвигов протонов

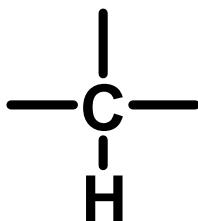


Группа протонов

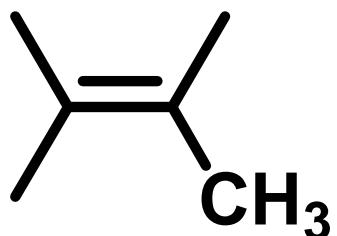
Хим. сдвиг, δ , м.д.

Насыщенные группы

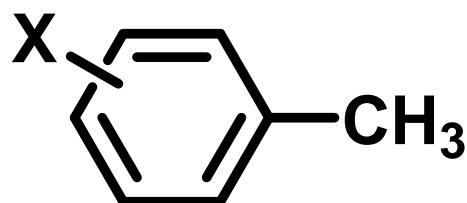
Алканы



0.8 – 1.6

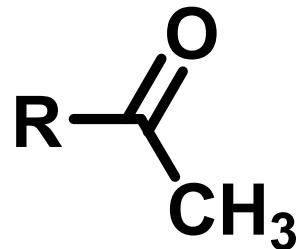


1.6 – 1.9

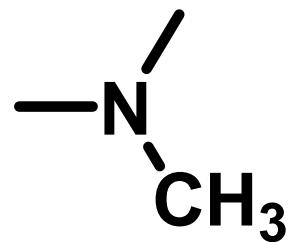


2.2 – 2.5

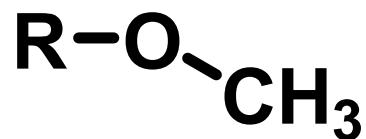
Ядерный магнитный резонанс



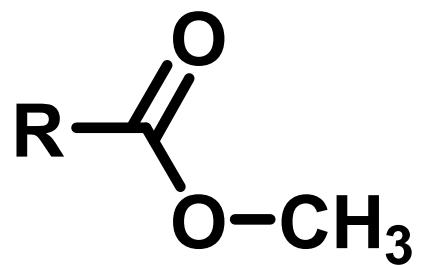
2.0 – 2.5



2.2 – 2.6



3.2 – 4.0

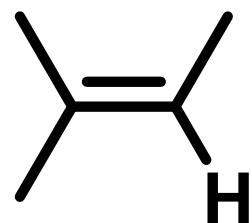


3.6 – 4.1

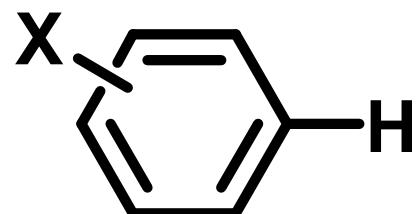
Ненасыщенные группы



2.5 – 3.0



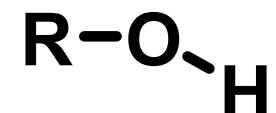
4.5 – 7.0



7 – 9

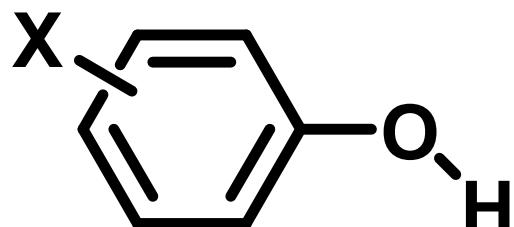
или Hetaryl-H

Функциональные группы



спирты

3 – 6



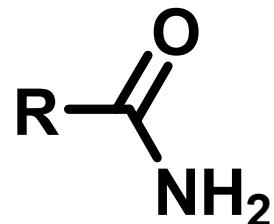
фенолы

6 – 8



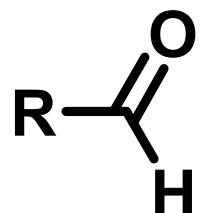
амины

2 – 4



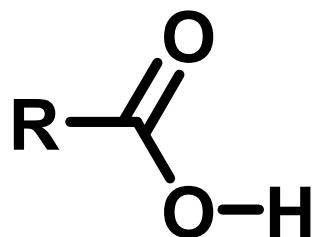
амиды

7 – 8



альдегиды

9 – 11

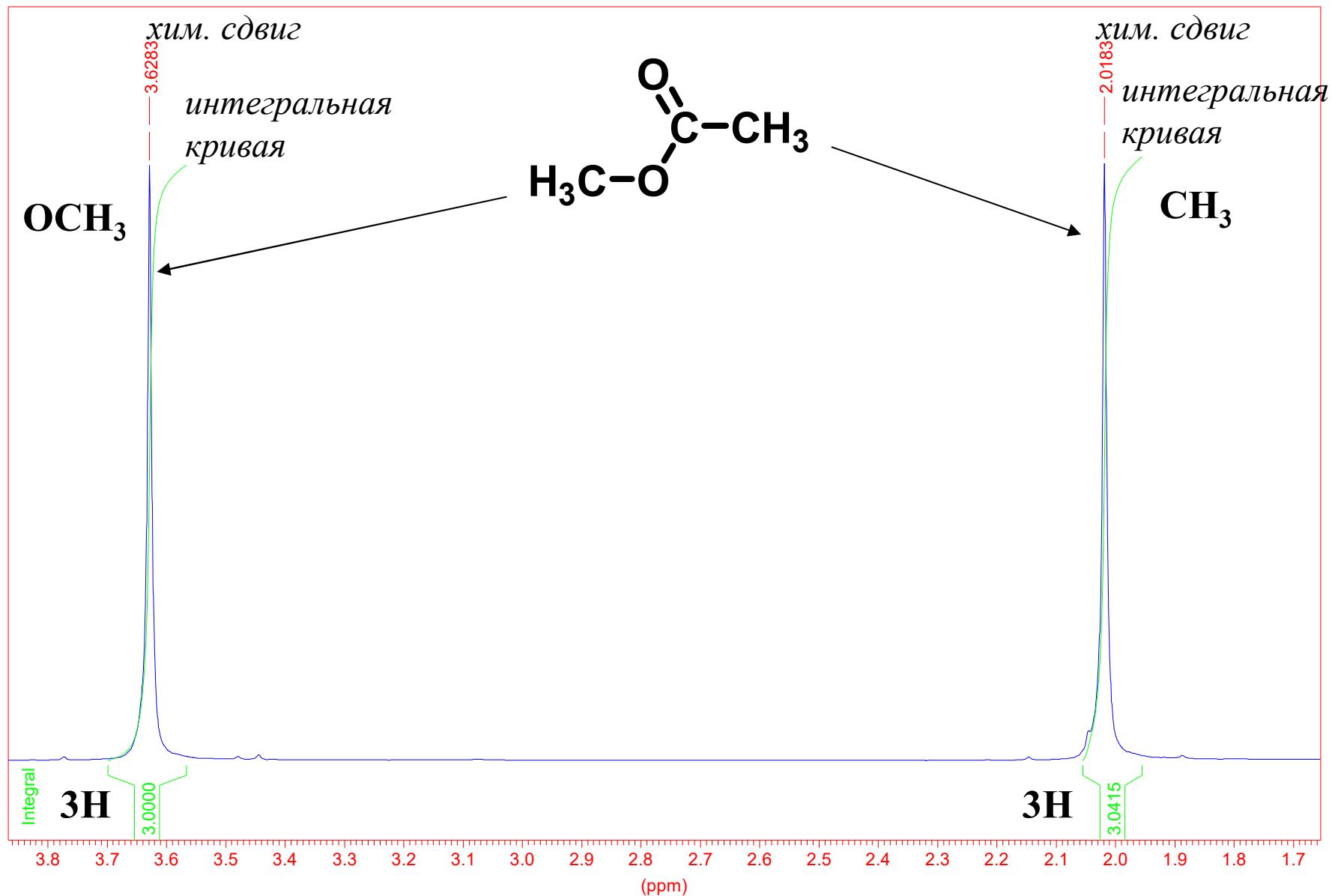


кислоты

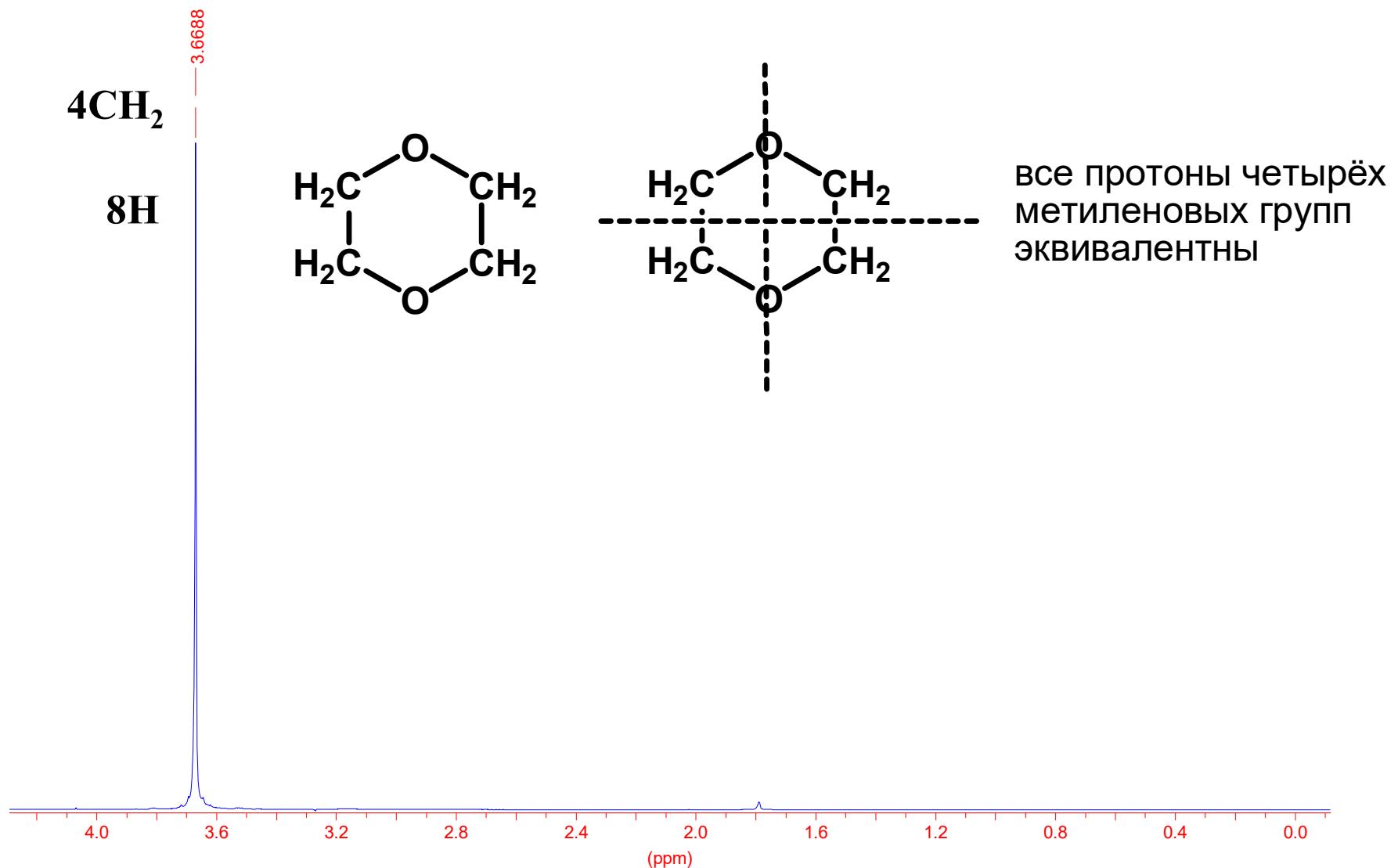
10 – 13

Примеры спектров ЯМР ^1H (ПМР) без спин-спинового взаимодействия

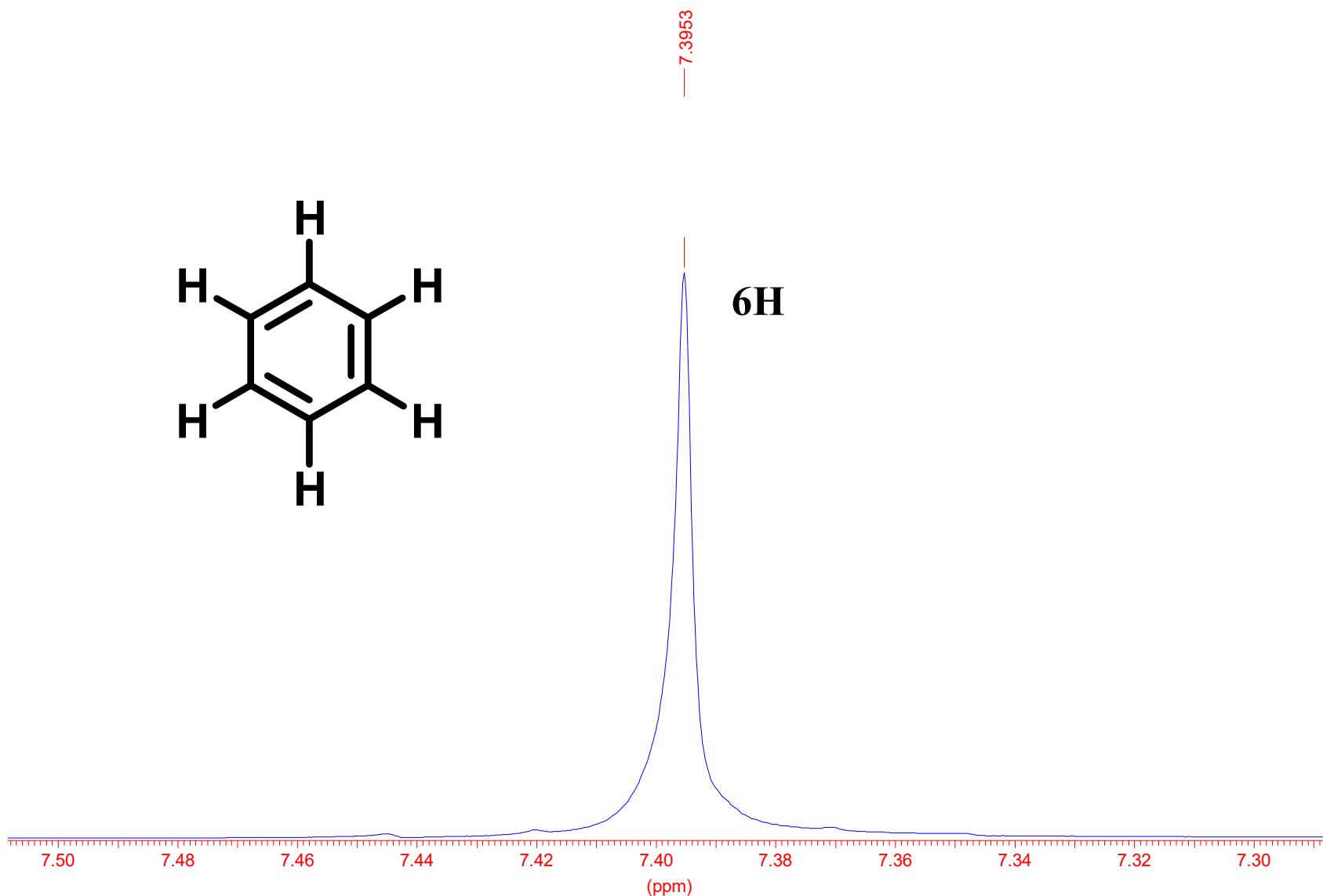
Спектр ЯМР ^1H метилацетата



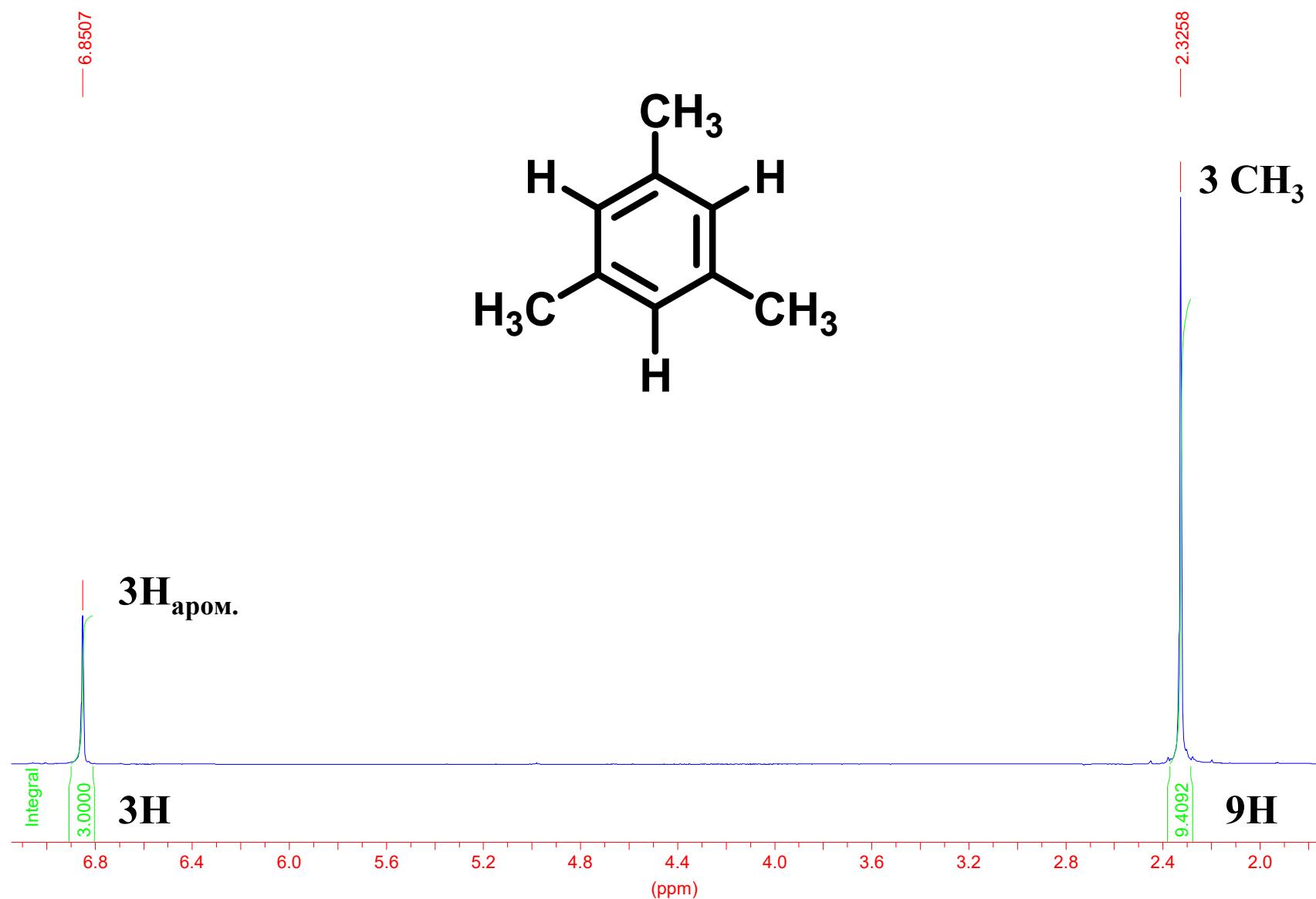
Спектр ЯМР ^1H 1,4-диоксана



Спектр ЯМР ^1H бензола



Спектр ЯМР ^1H мезитилена (1,3,5-триметилбензола)



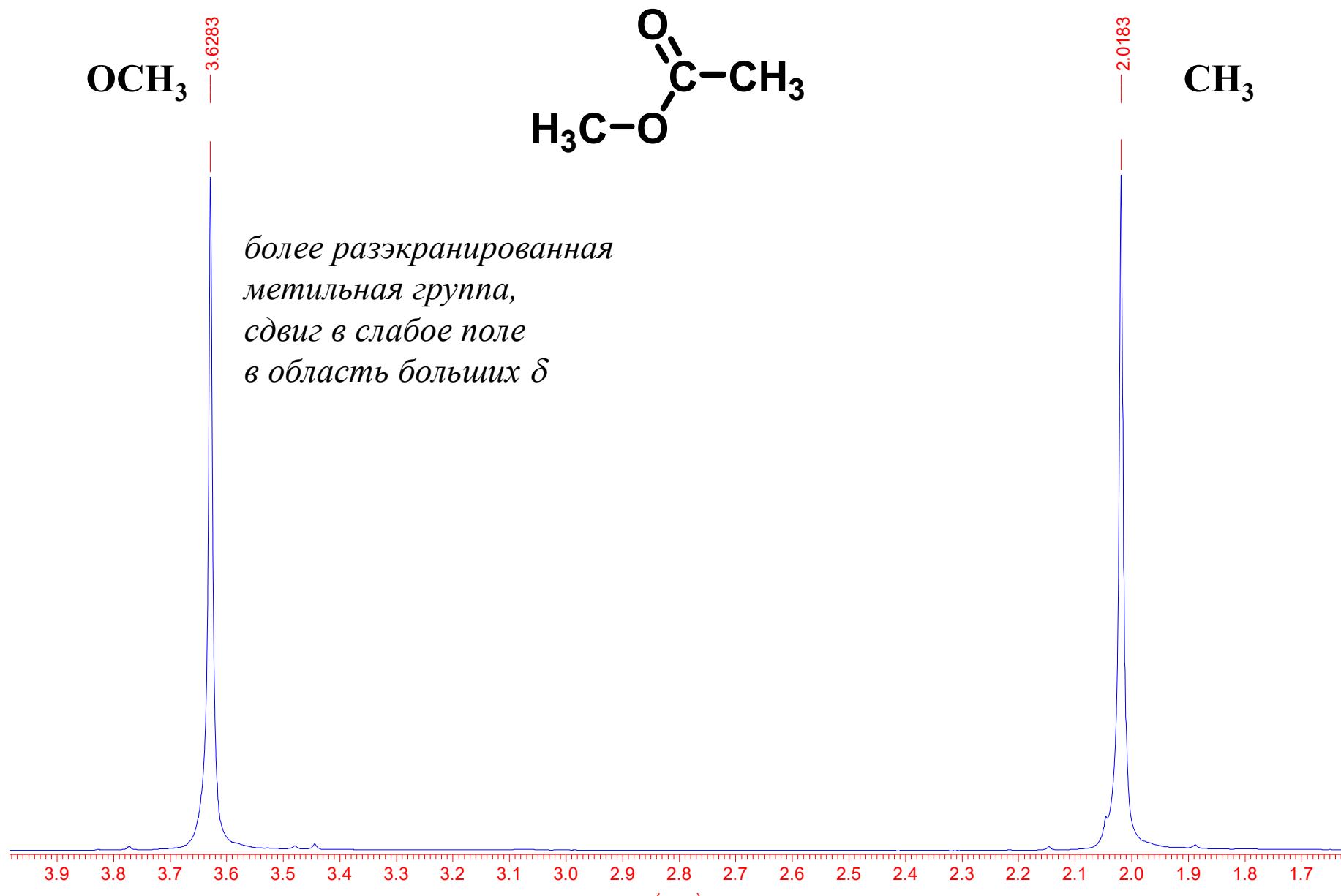
Факторы, влияющие на хим. сдвиг

I. Индуктивный эффект заместителей.

**Наличие рядом с протонами
электроноакцепторных группировок
приводит к разэкранированию этих
протонов (оттягиванию электронной
плотности от протонов) и сдвигу их сигнала
в более слабое поле, в область больших
значений δ .**

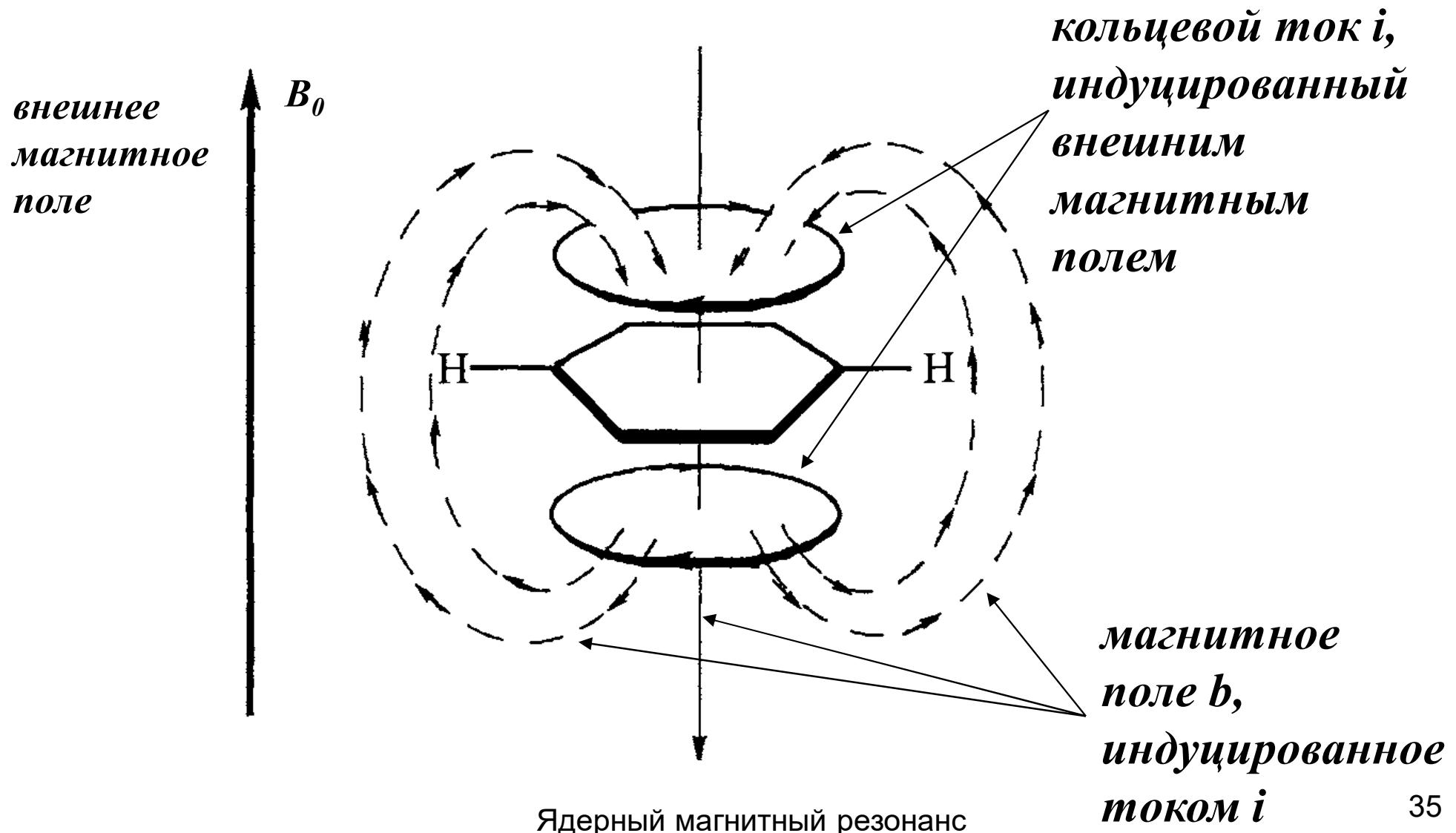
Соединение $X-CH_3$	H-CH₃ (CH₄)	I-CH₃	Br-CH₃	HO-CH₃	F-CH₃
Электро- отрицатель- ность группы X	2.1	2.5	2.8	3.5	4.0
Хим. сдвиг δ (м.д) группы CH_3	0.2	2.2	2.7	3.4	4.3

Спектр ЯМР ^1H метилацетата

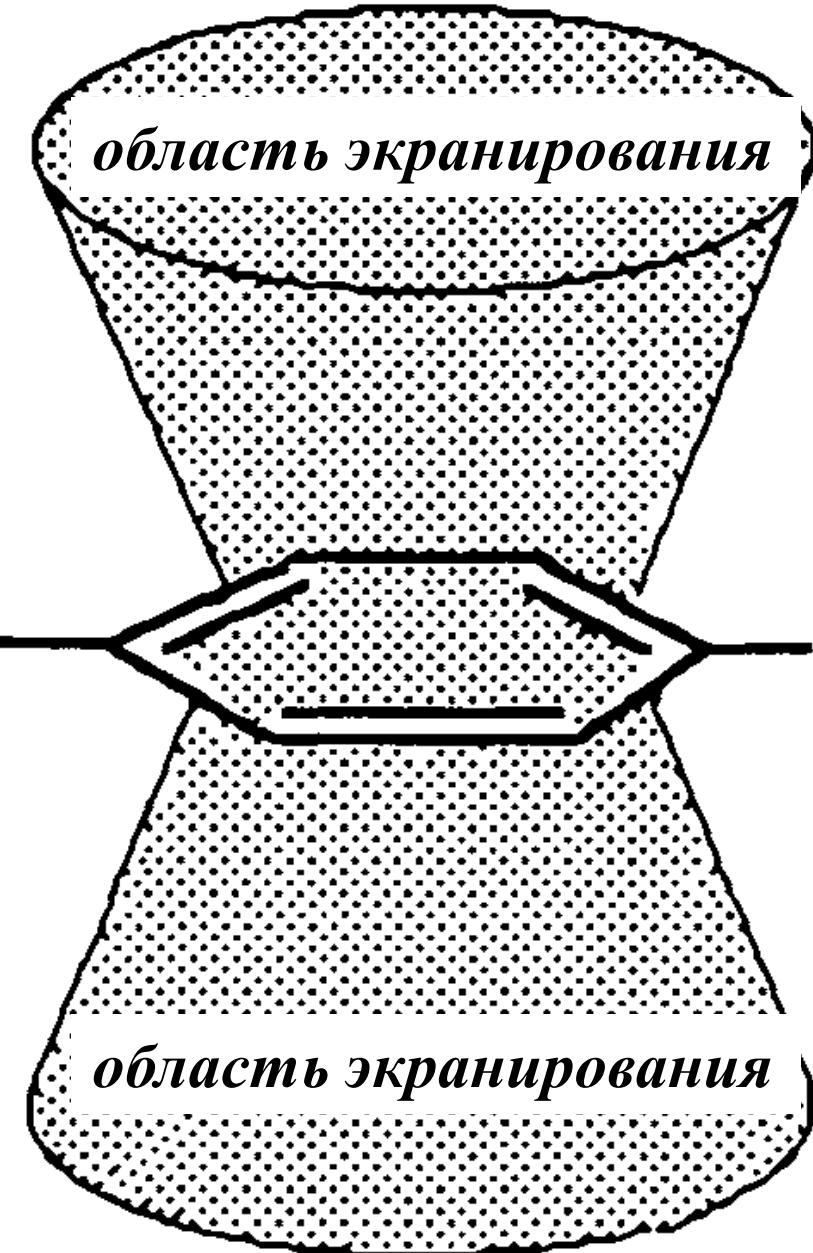


II. Анизотропный эффект

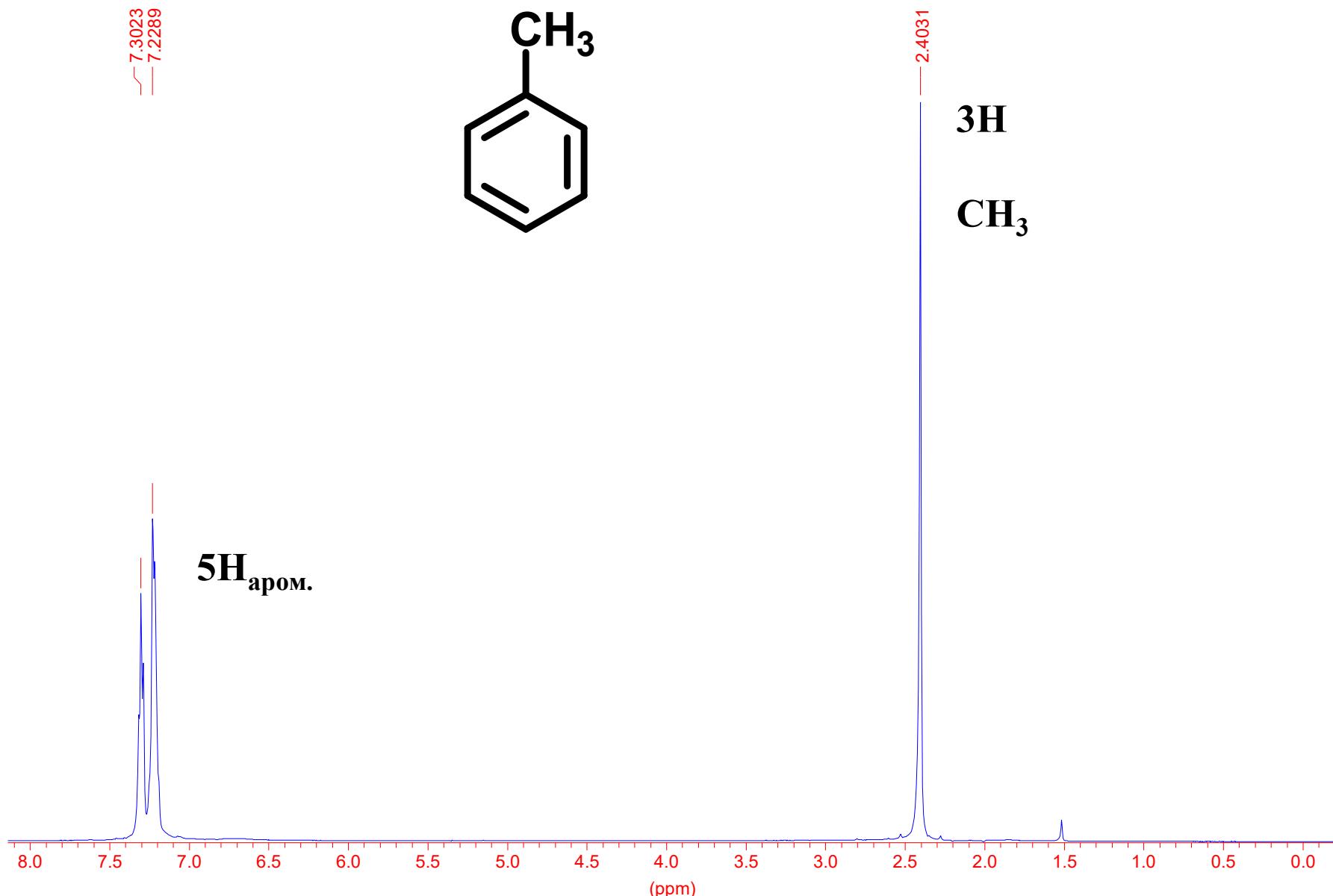
Эффект кольцевого тока в бензольном ядре.



*область разэкранирования
– сдвиг сигнала
протонов в слабое
поле в область
больших δ*

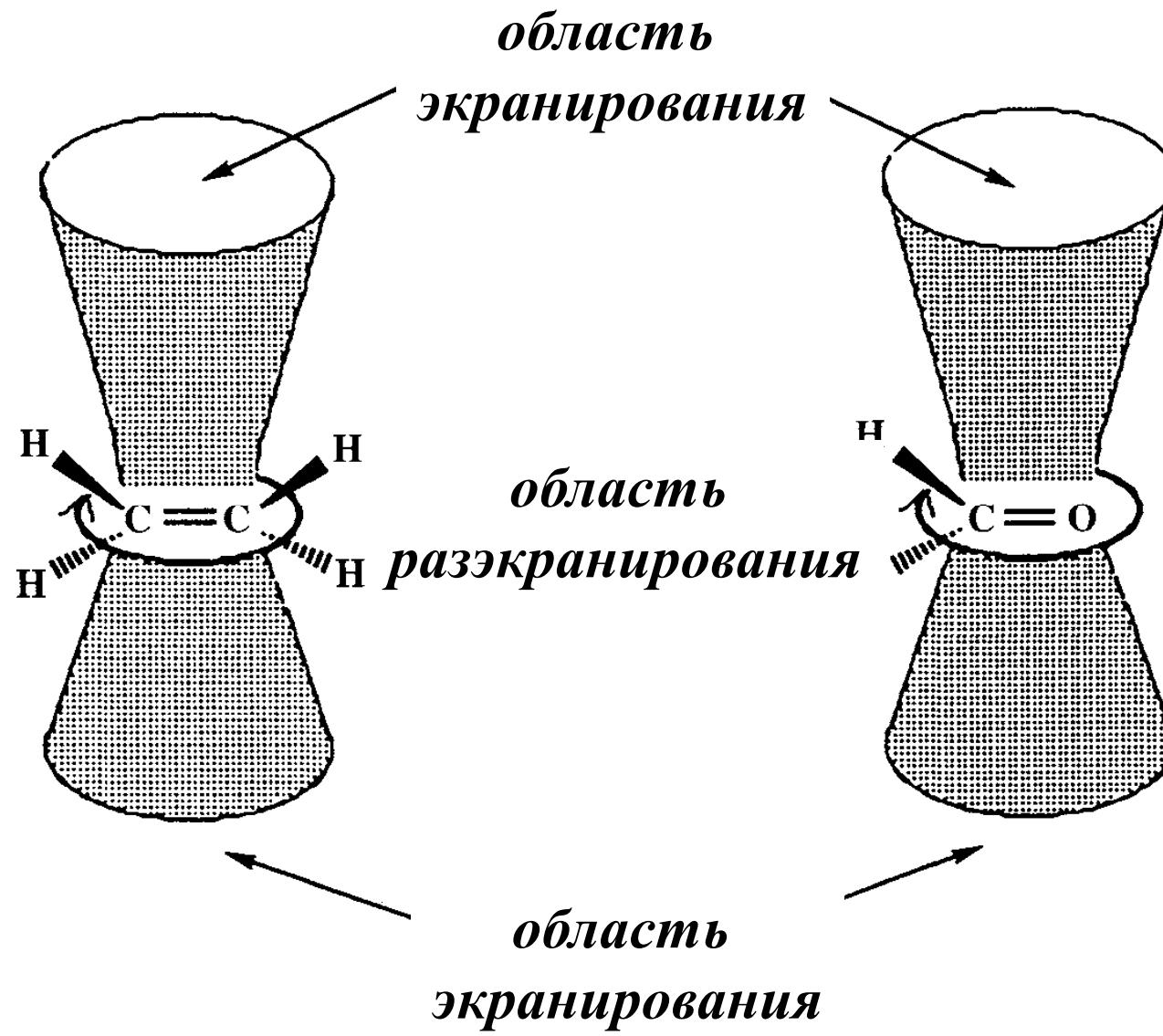


Спектр ЯМР ^1H толуола

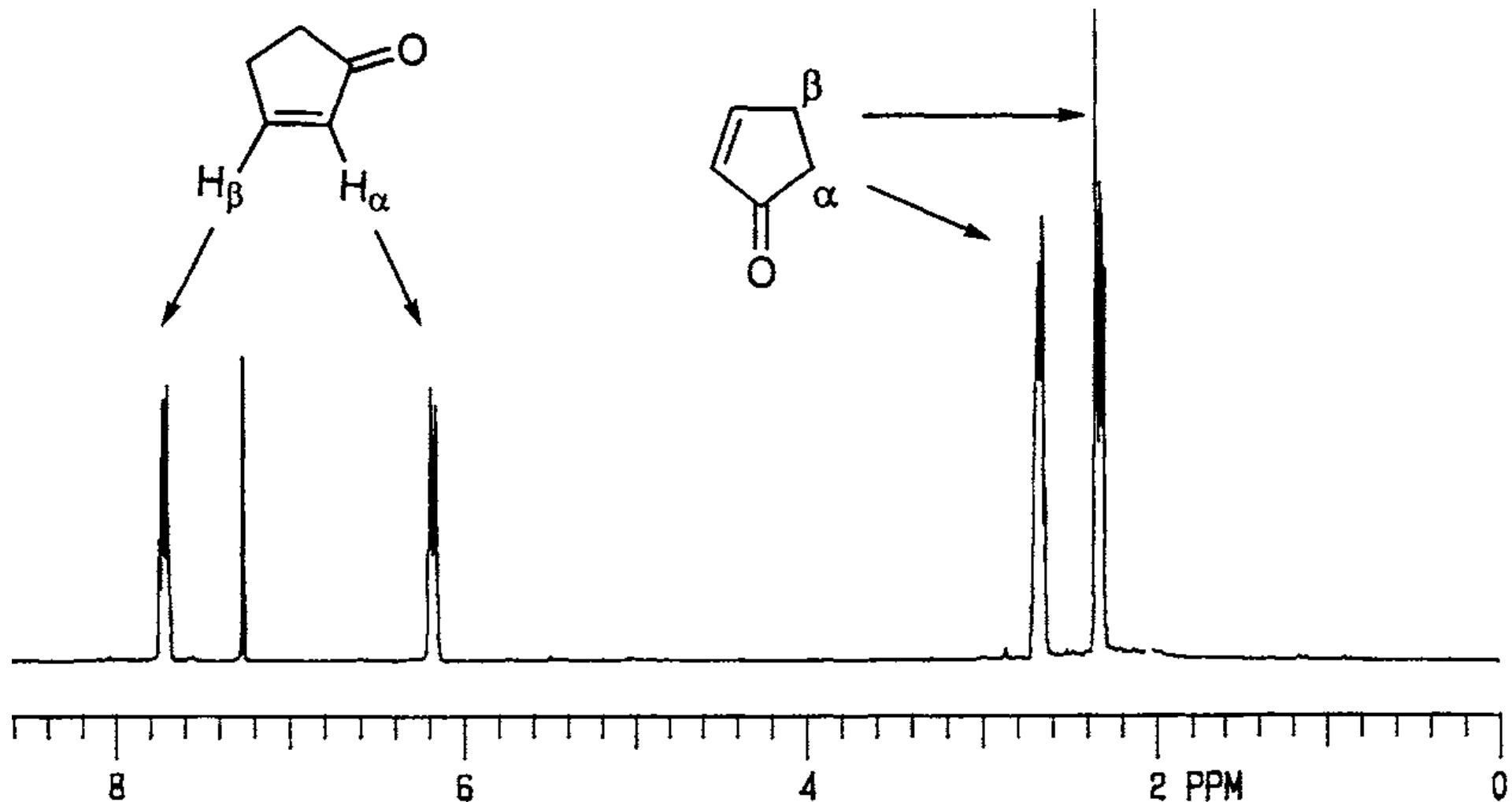


Магнитный анизотропный эффект

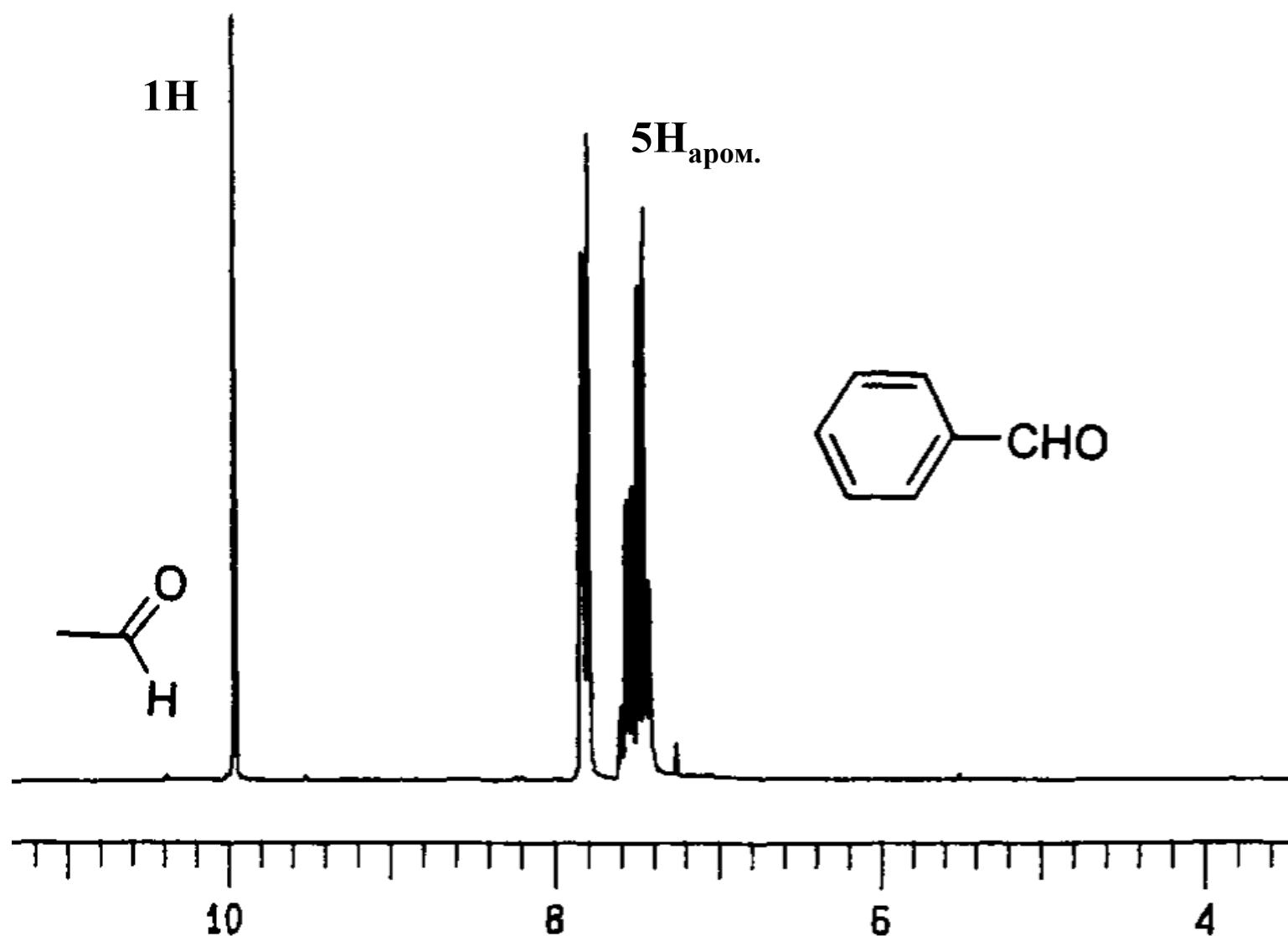
двойных связей C=C и C=O



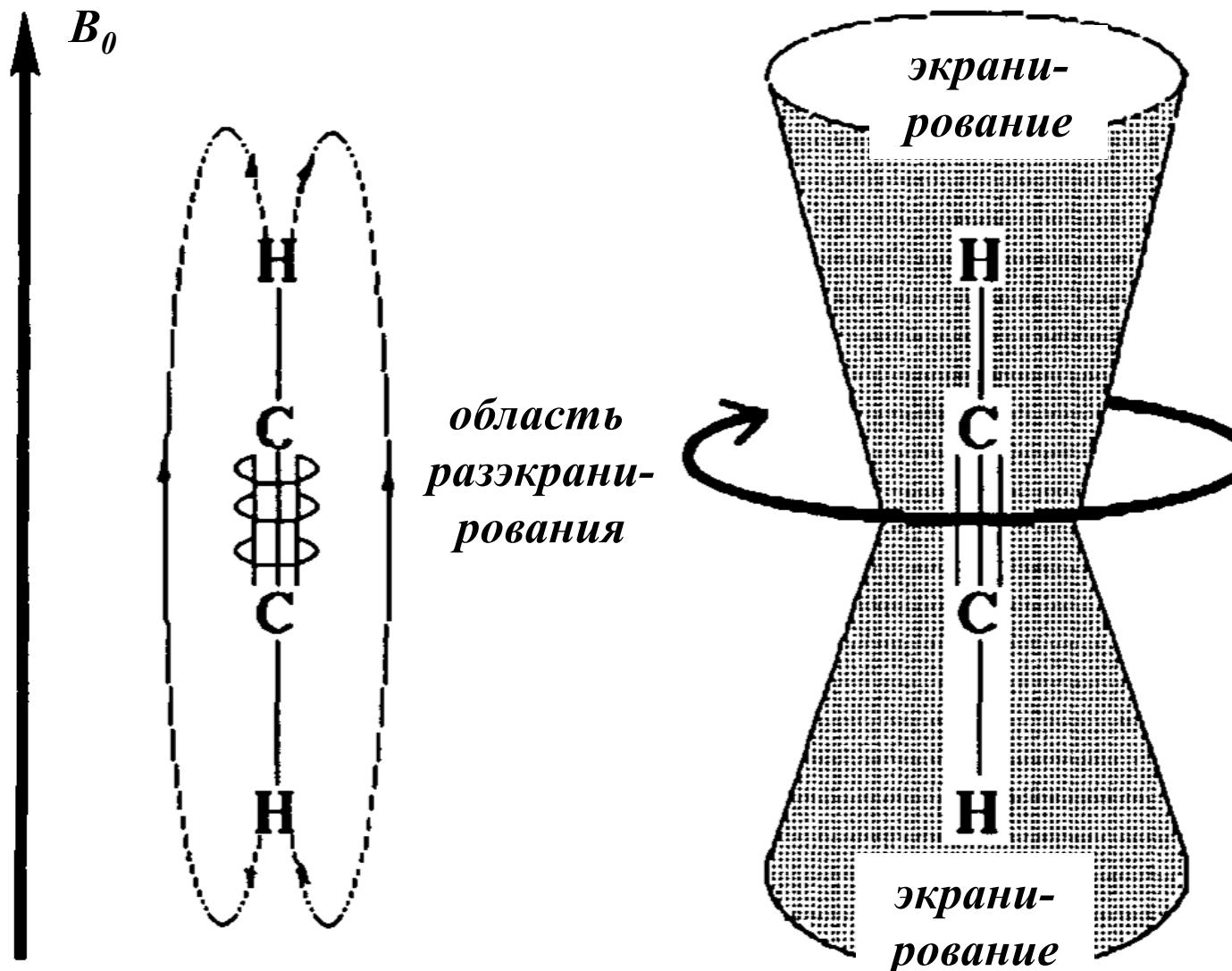
Спектр ЯМР ^1H цикlopентен-2-она



Спектр ЯМР ^1H бензальдегида

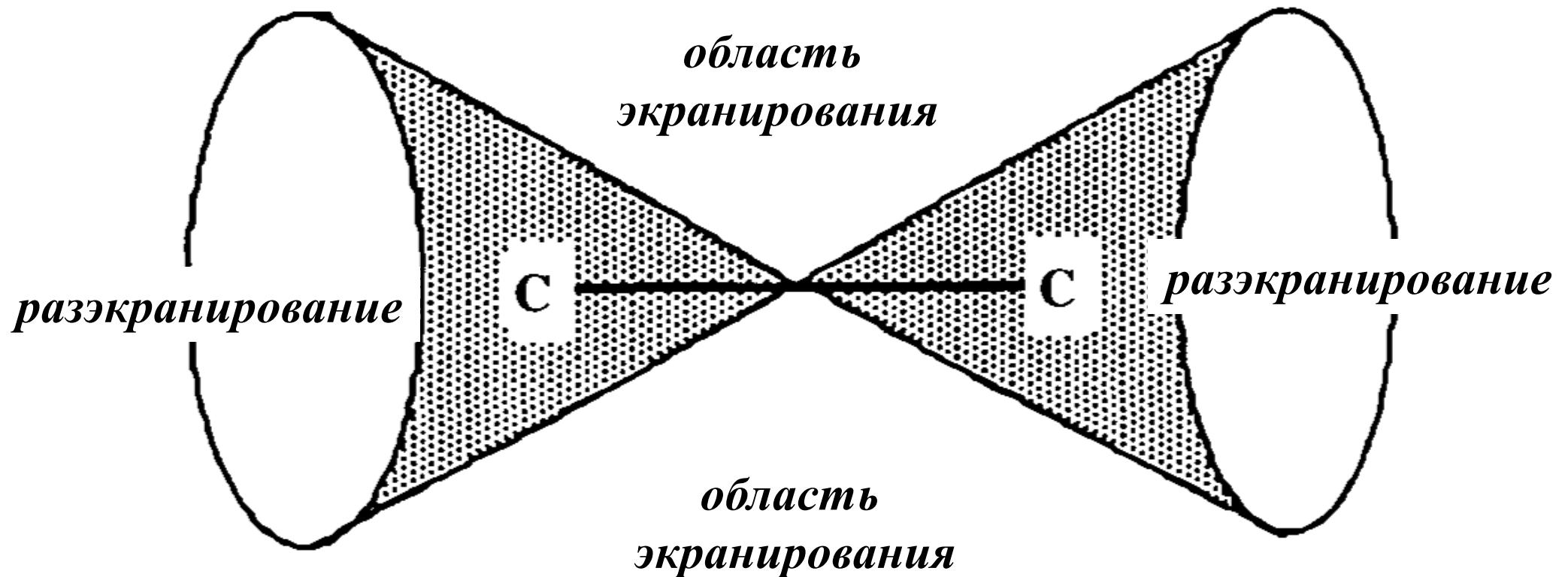


Магнитный анизотропный эффект ацетиленовой связи C≡C



Магнитный анизотропный эффект

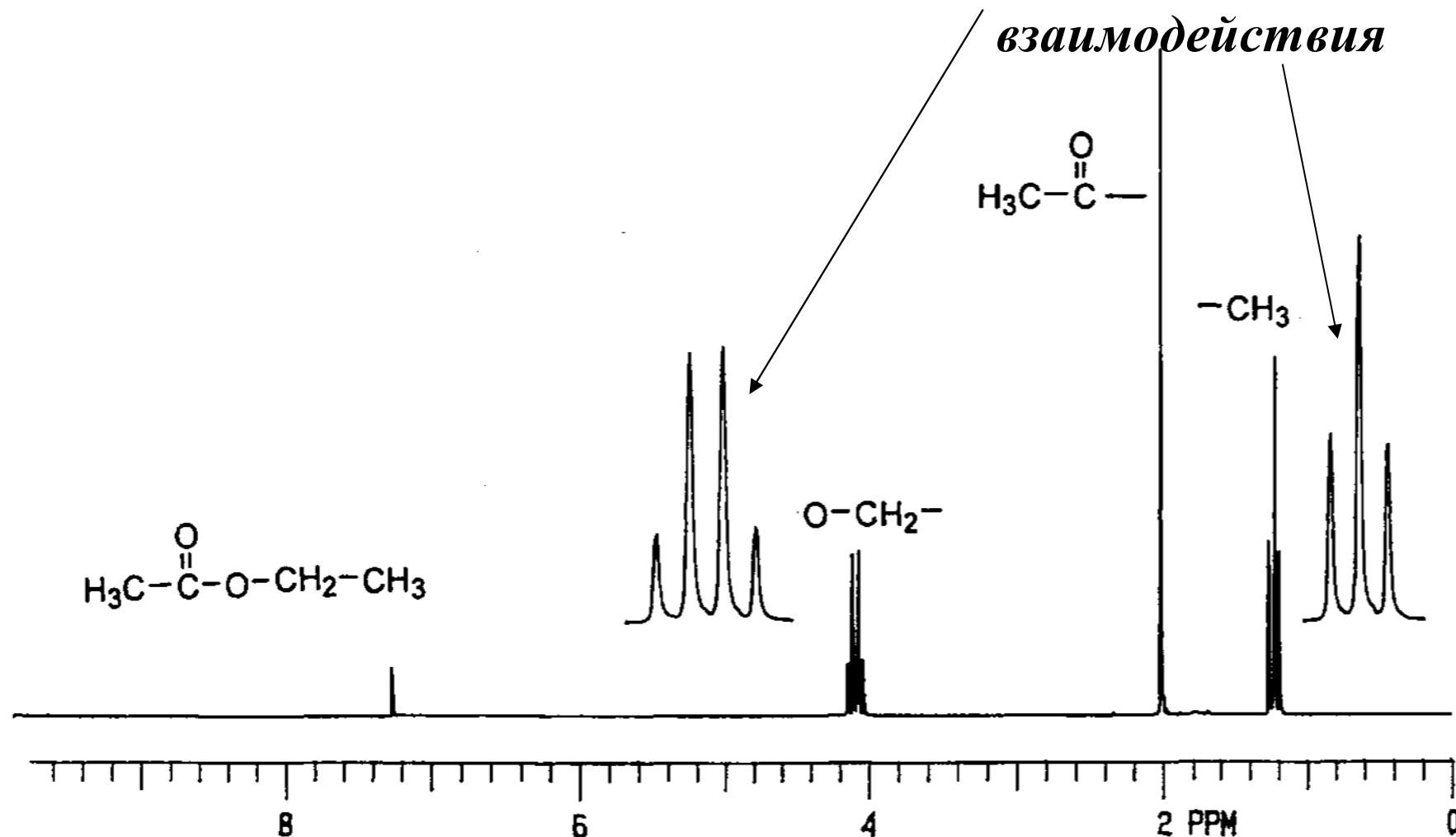
простой связи C–C



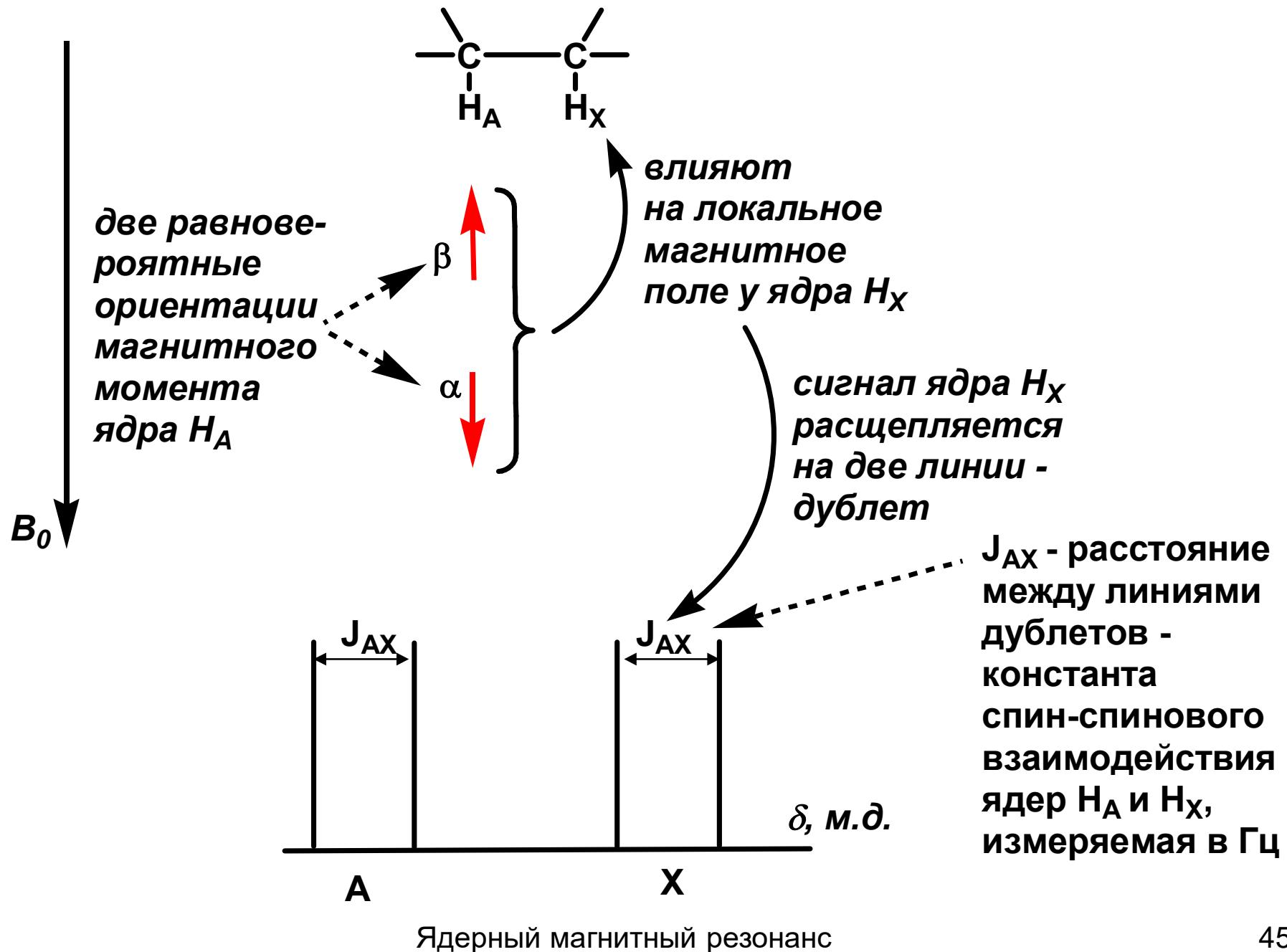
Спин-спиновое взаимодействие между протонами

Спектр ЯМР ^1H этилацетата

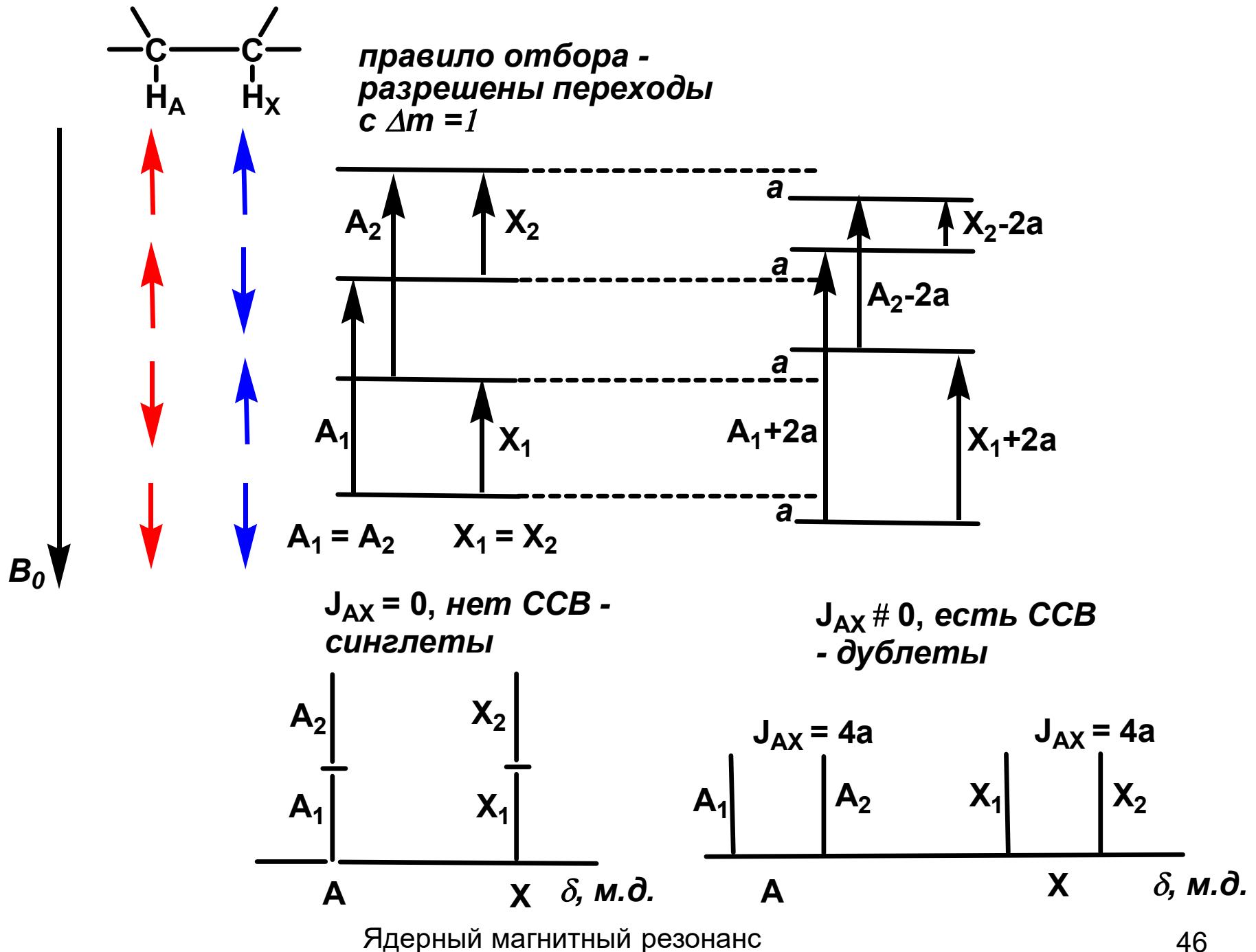
*мультиплетность
сигналов –
проявление
спин-спинового
взаимодействия*



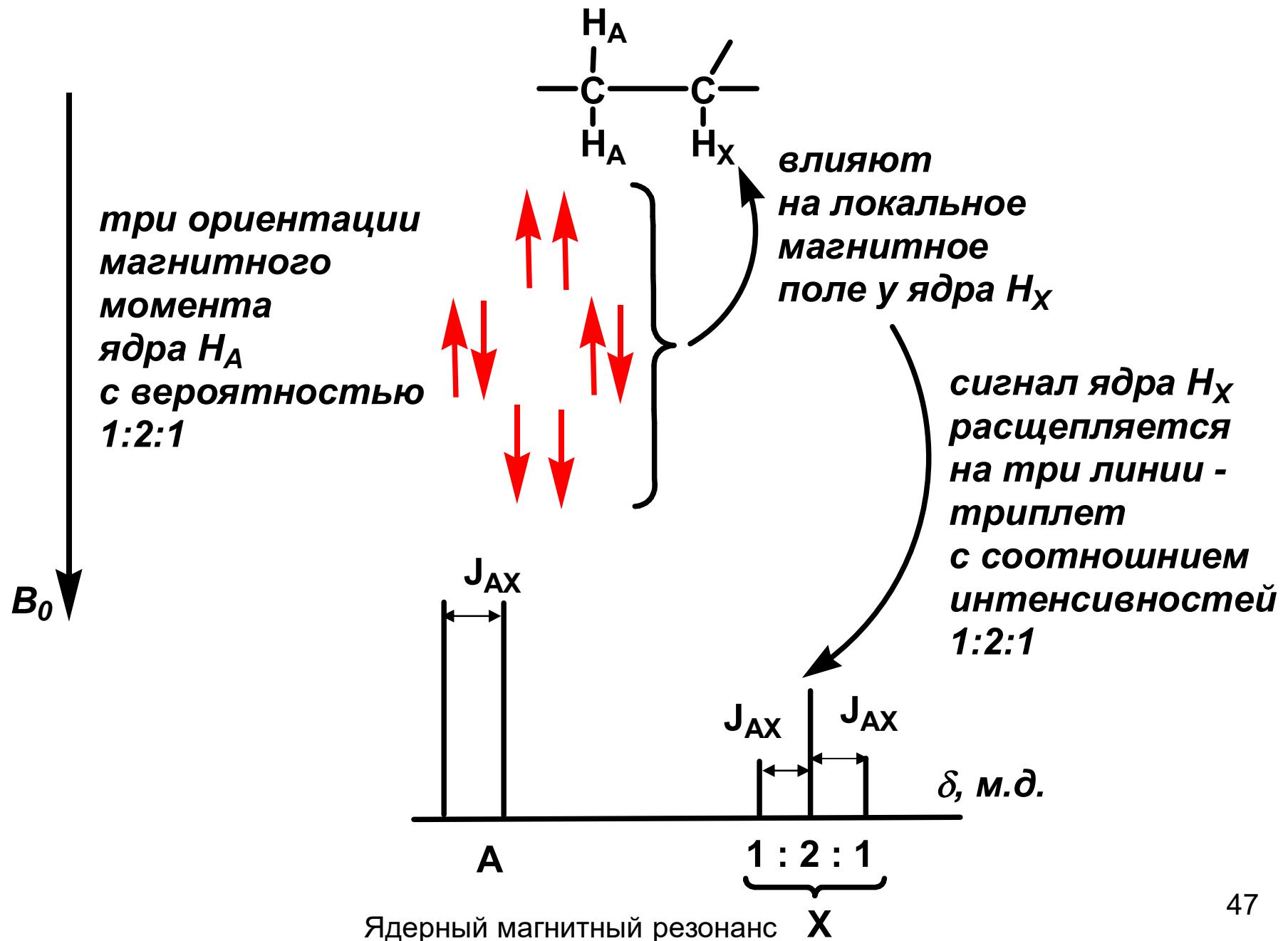
Рассмотрим фрагмент >CH–CH< :



Рассмотрим единую спиновую систему ядер фрагмента $\text{CH}_A\text{--CH}_X$:



Рассмотрим фрагмент $-\text{CH}_2-\text{CH}^<$:



Общая формула мультиплетности сигналов в ЯМР:

$$M_A = 2N_X I_X + 1$$

M_A – мультиплетность сигнала ядер данной группы

N_X – количество ядер в соседней группе связанных спин-спиновым взаимодействием с ядрами данной группы

I_X – спин ядер соседней группы

Для протонов $I_X = 1/2$, т.е. :

$$M_A = N_X + 1$$

Правило мультиплетности в спектрах ПМР (ЯМР ^1H):

При наличии спин-спинового взаимодействия мультиплетность сигналов в спектрах ПМР определяется количеством ядер в соседней группе плюс единица.

Относительная интенсивность сигналов внутри мультиплетов. Треугольник Паскаля

Число ядер X	Сигнал							
0			1					<i>синглет</i>
1			1	1				<i>дублет</i>
2			1	2	1			<i>триплет</i>
3		1	3	3	1			<i>квартет</i>
4	1	4	6	4	1			<i>квинтет</i>
5	1	5	10	10	5	1		<i>сексстет</i>
6	1	6	15	20	15	6	1	<i>септет</i>

Передача спин-спинового взаимодействия

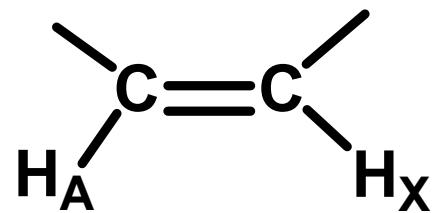
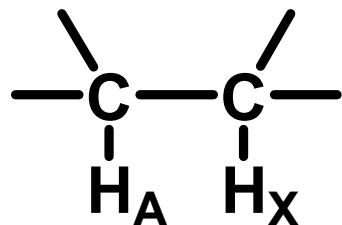
В органических соединениях спин-спиновое взаимодействие передаётся в насыщенных фрагментах по системе простых σ -связей через 3 связи;

в ненасыщенных фрагментах по системе π -связей через 4 (иногда 5) связей;

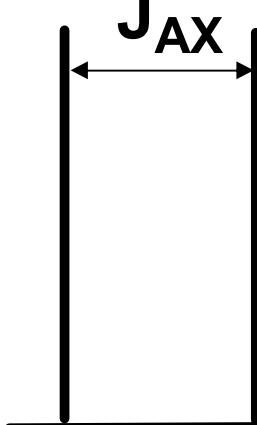
наличие гетероатома (O, N, S) может выключать протоны из спин-спинового взаимодействия.

Основные типы спиновых систем

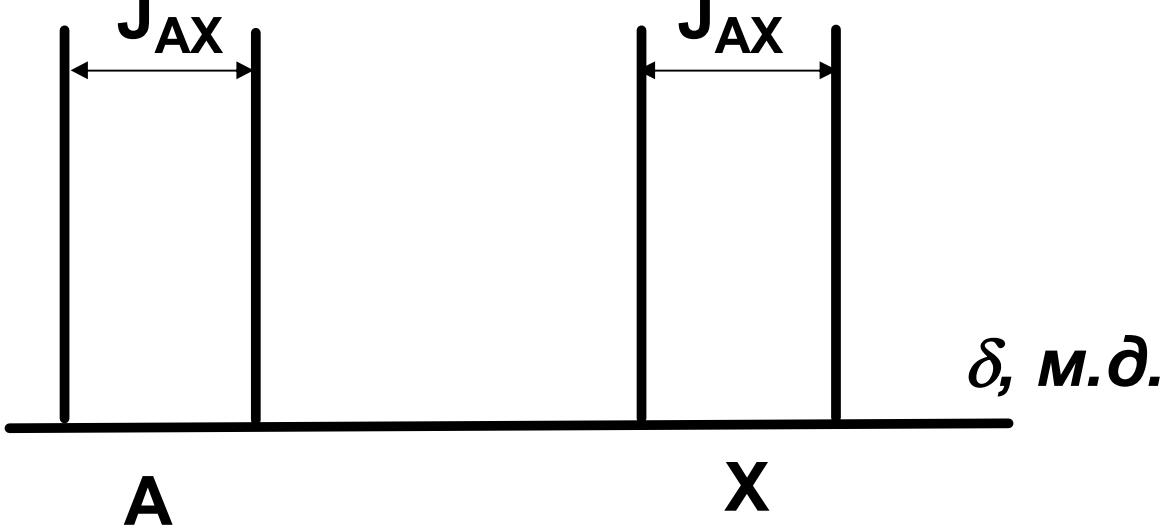
Система AX



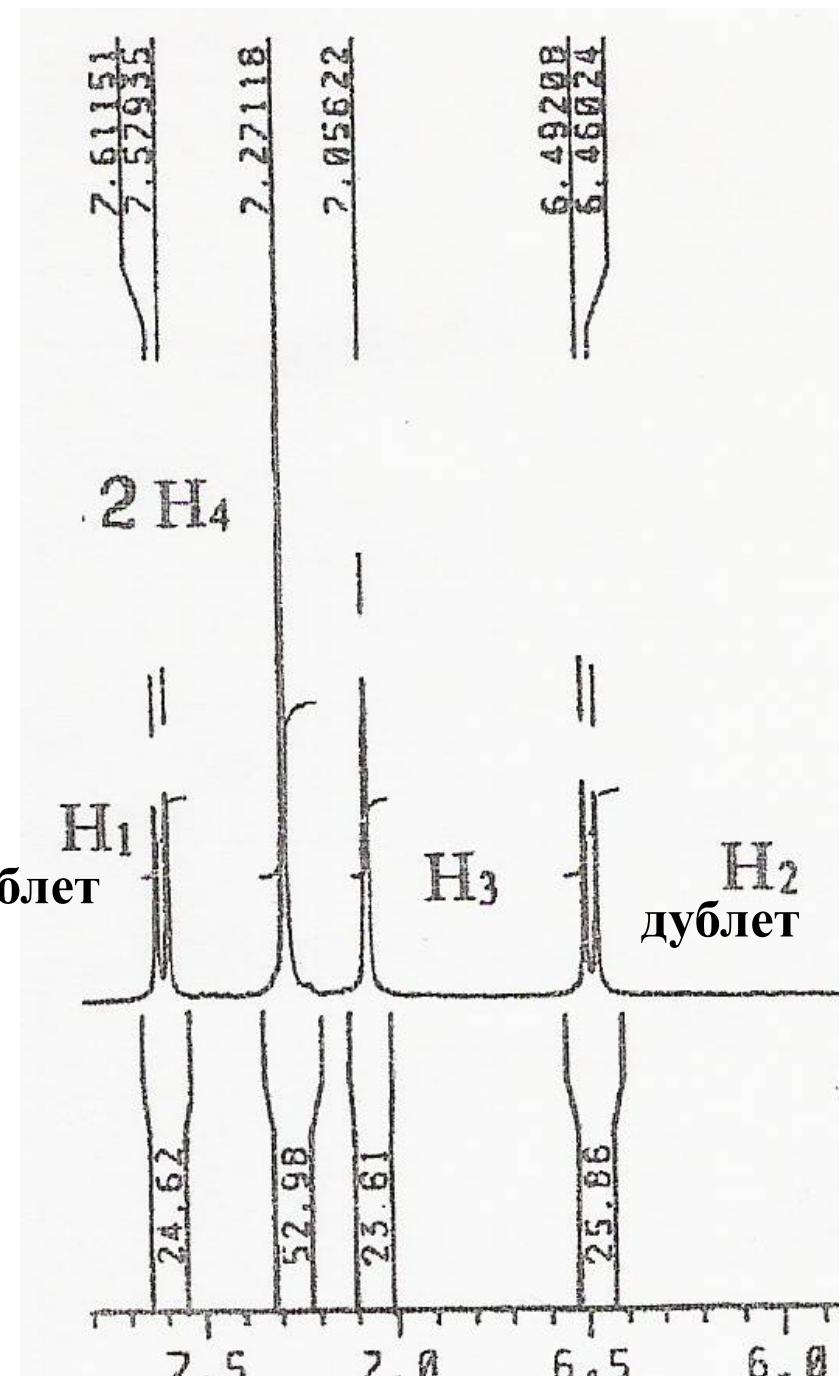
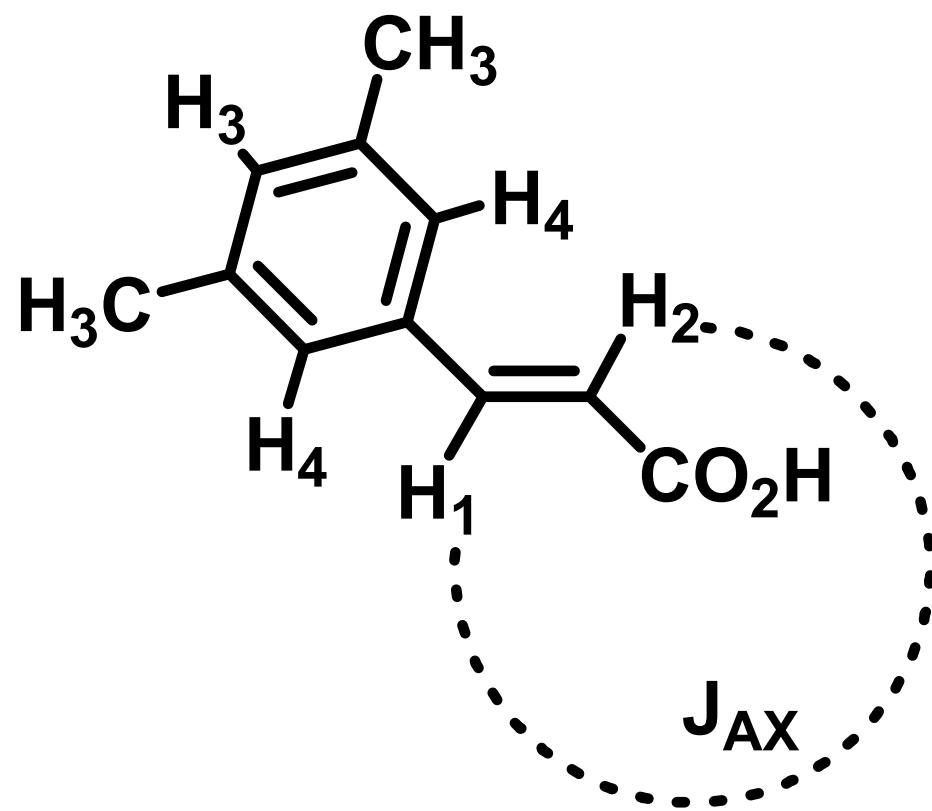
дублет



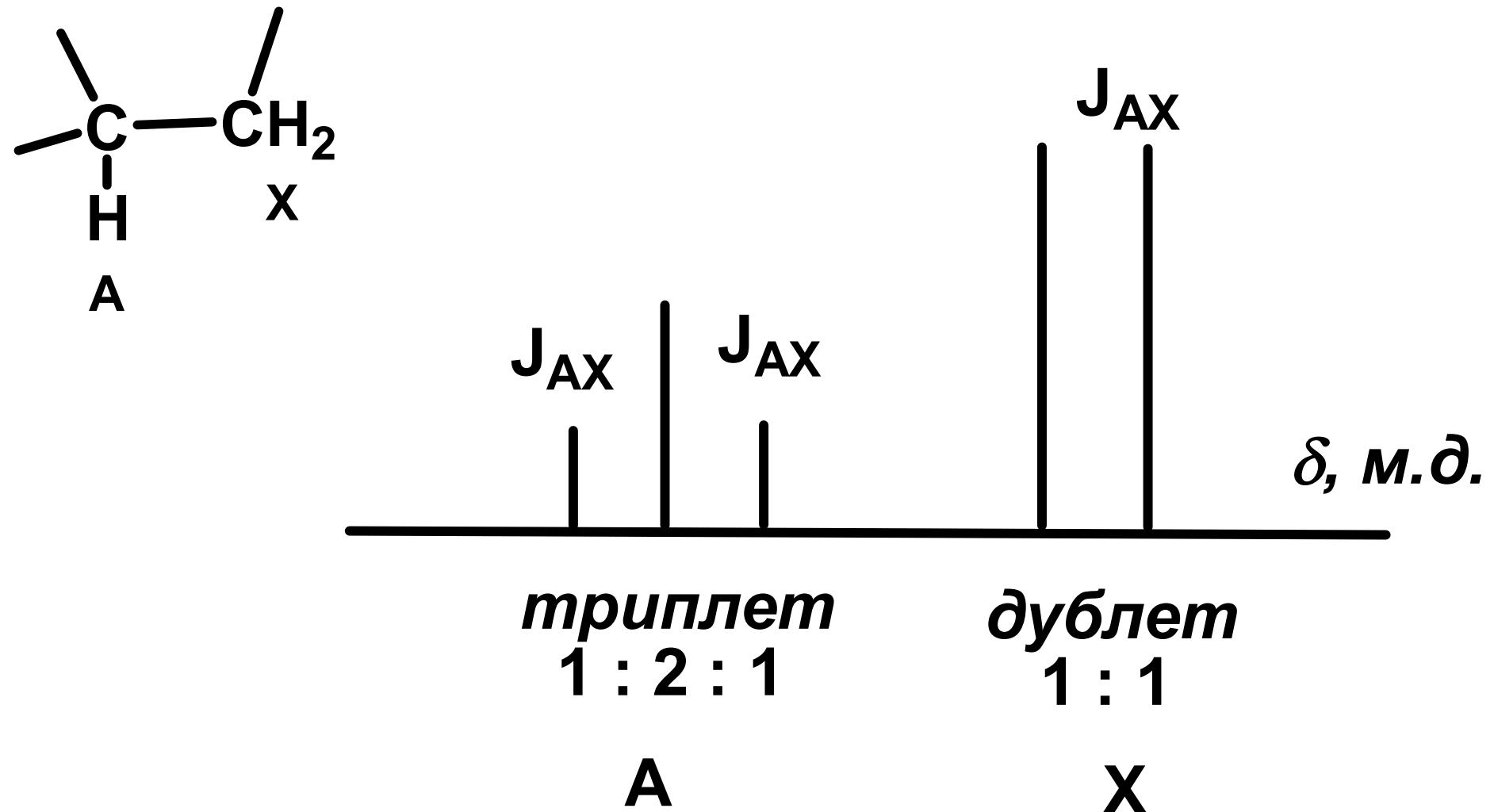
дублет



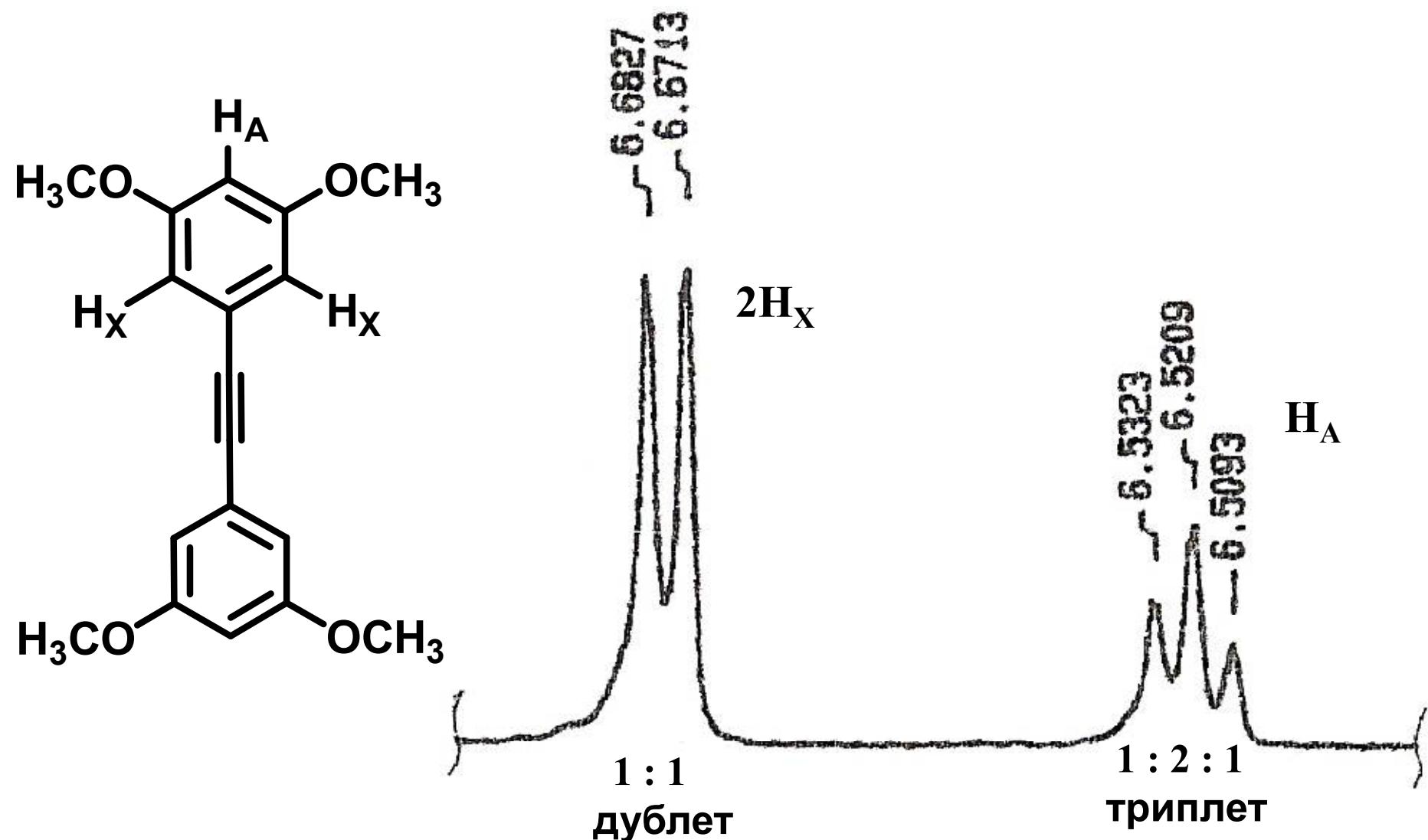
Фрагмент спектра ЯМР ^1H соединения



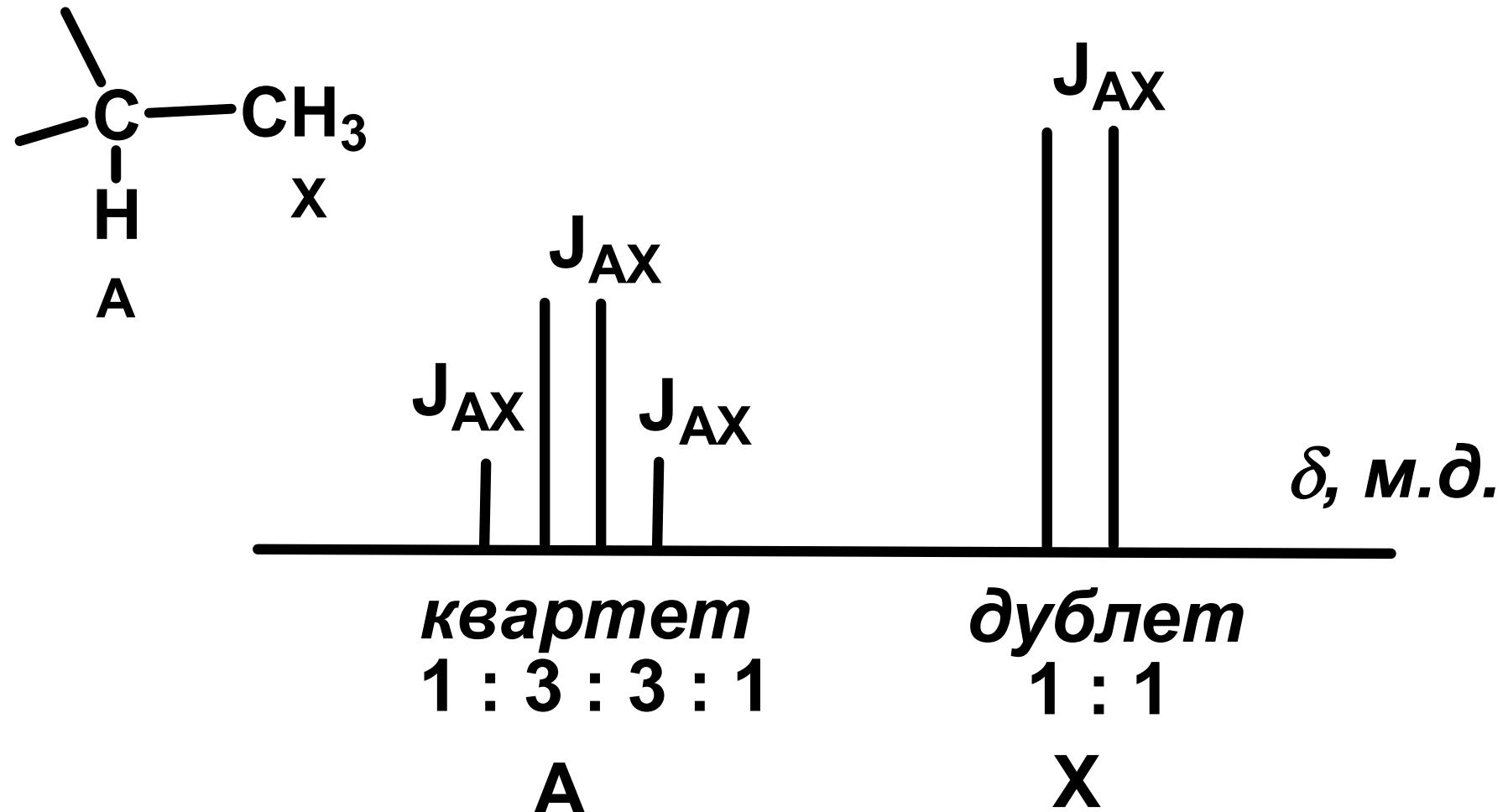
Система AX_2



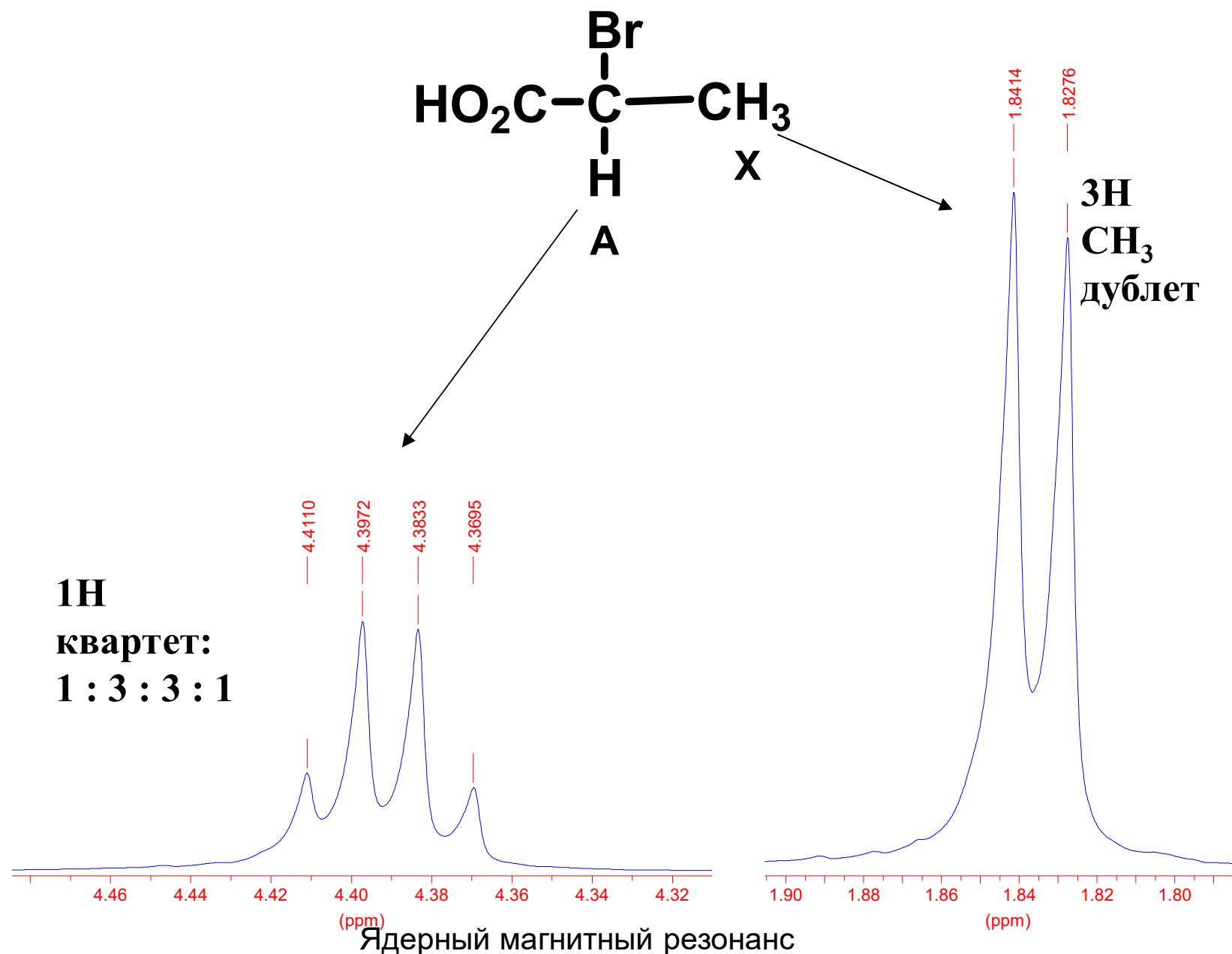
Фрагмент спектра ЯМР ^1H соединения



Система AX_3

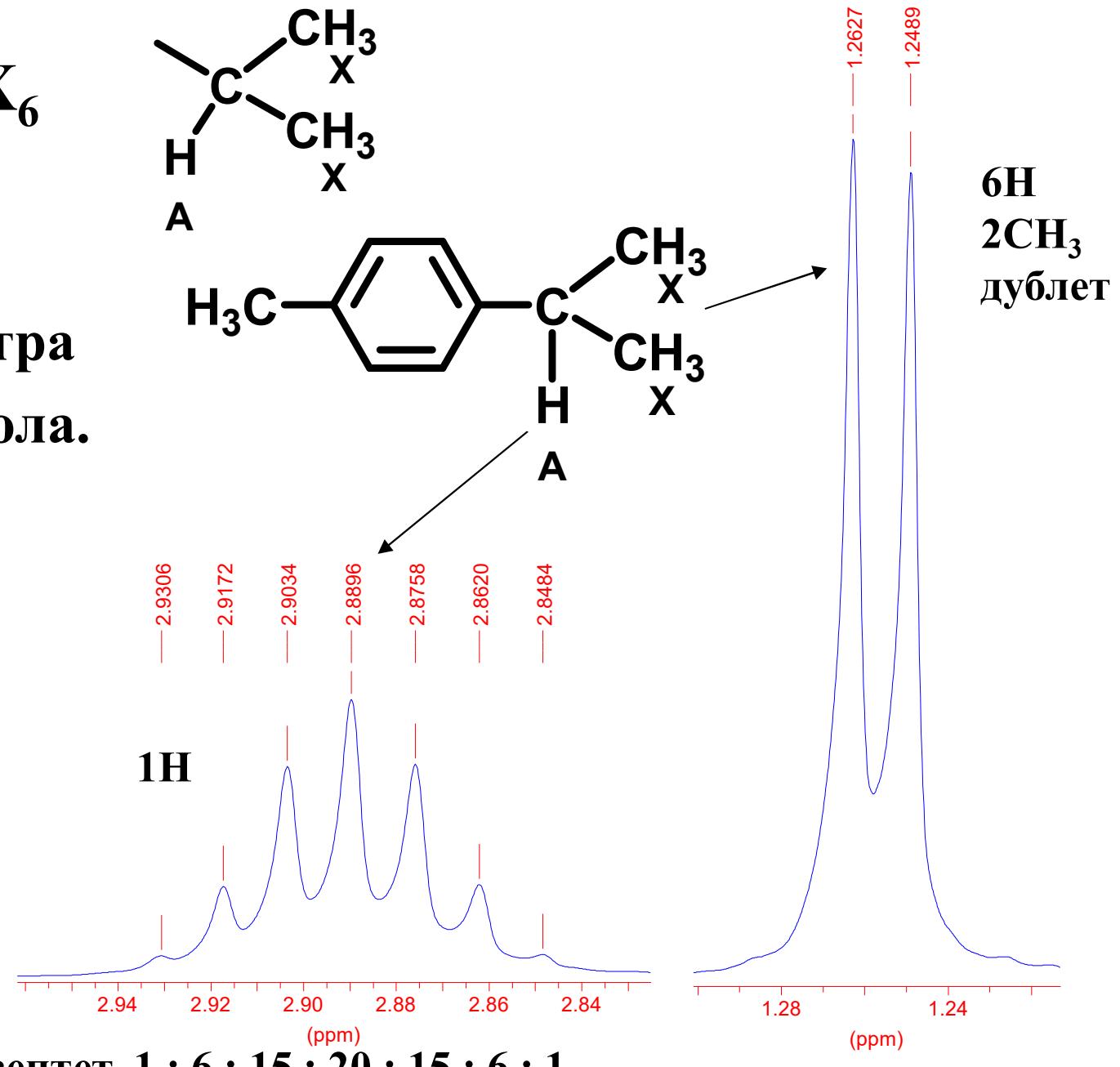


Спектр ЯМР ^1H α -бромпропионовой кислоты



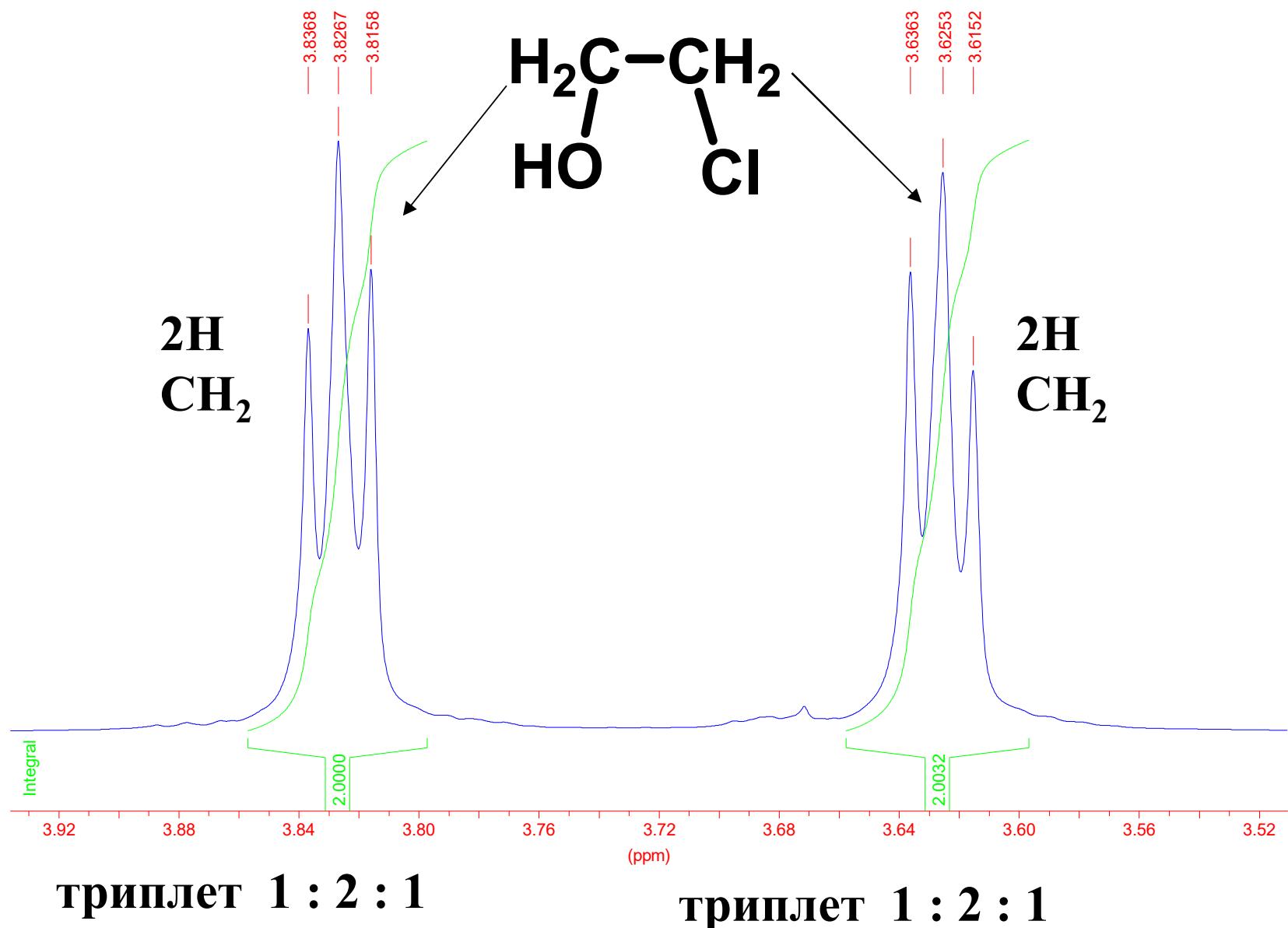
Система AX₆

Фрагмент спектра
ЯМР ¹H п-цимола.



Система A_2X_2

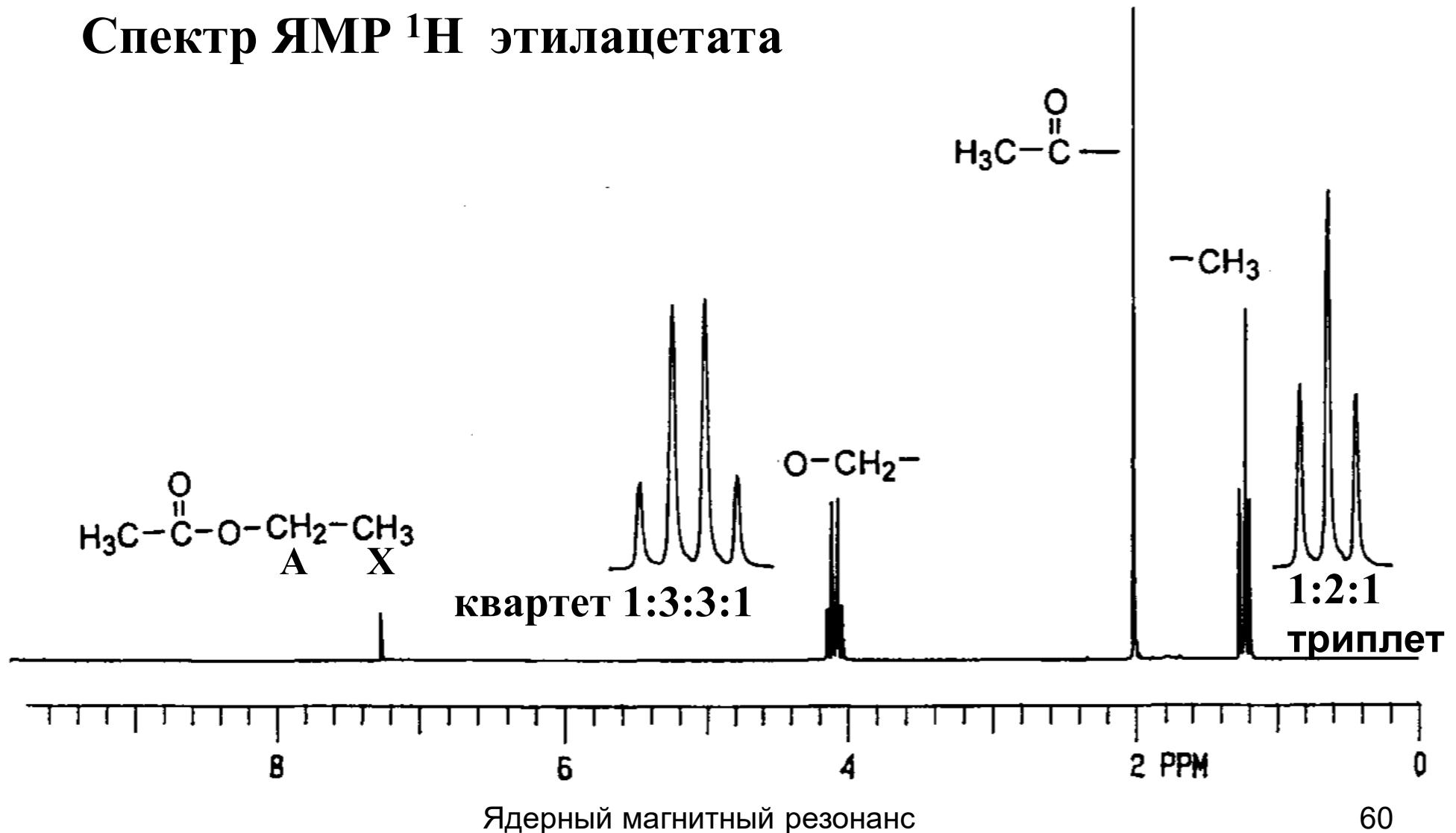
Спектр ЯМР 1H хлорэтанола



Ядерный магнитный резонанс

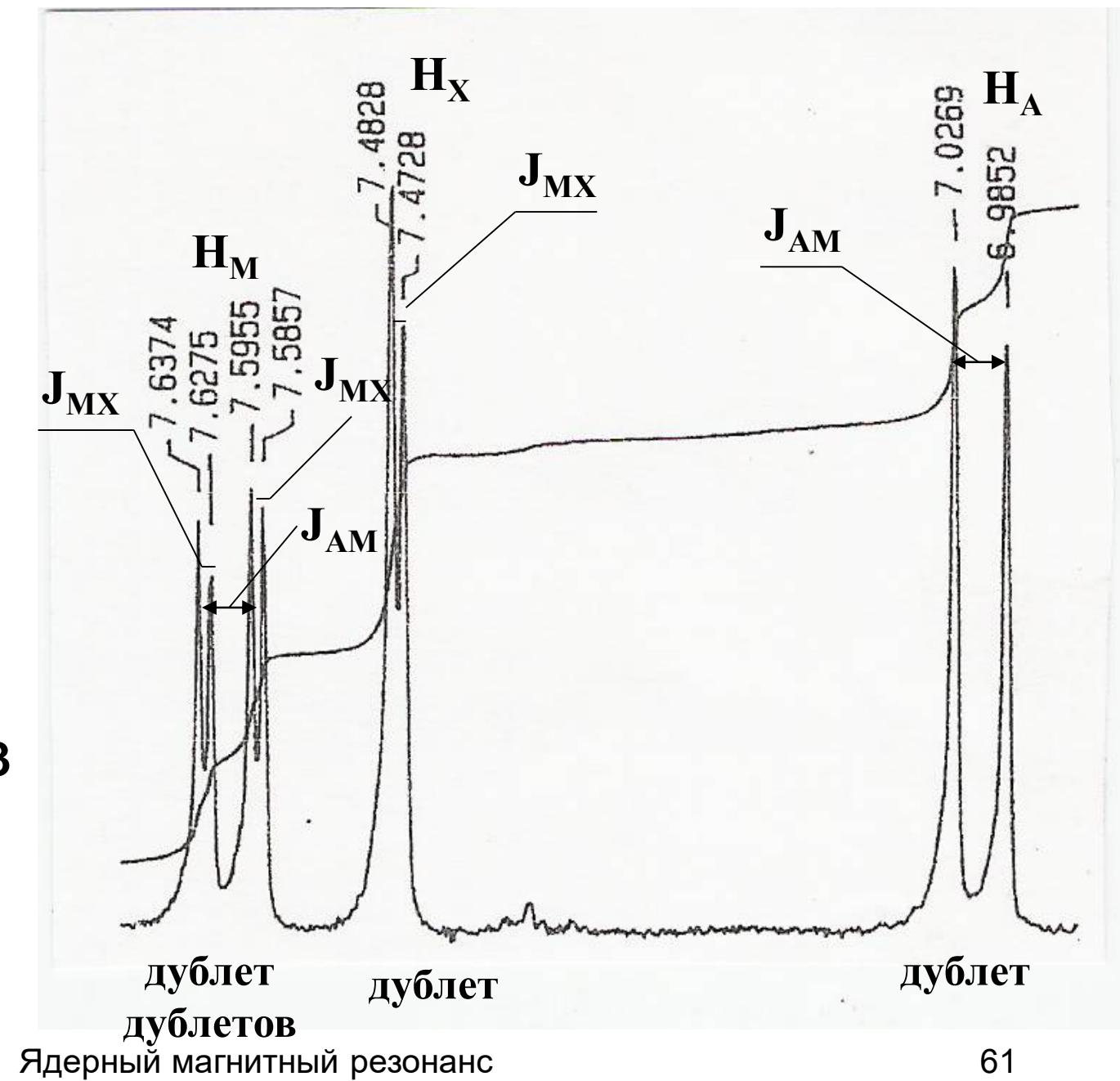
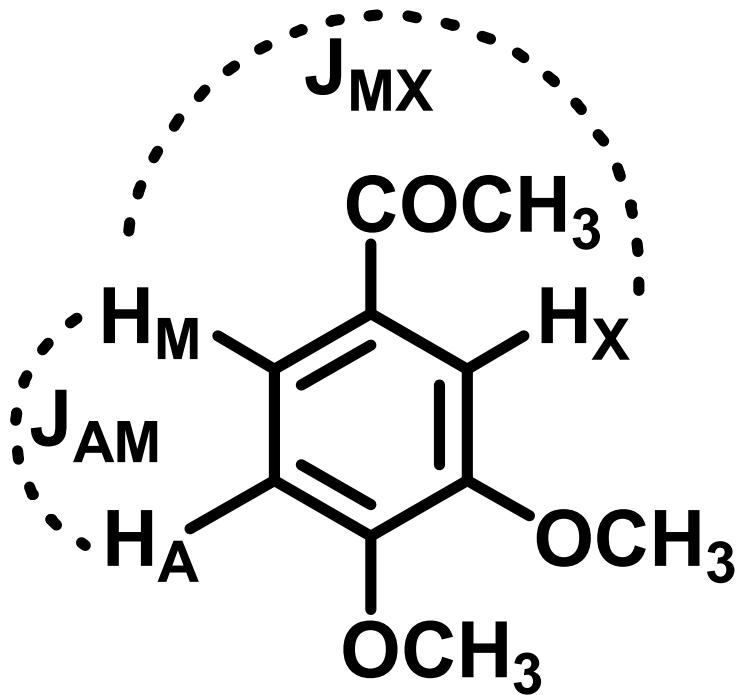
Система A_2X_3

Спектр ЯМР ^1H этилацетата



Трёхспиновая система AMX

Фрагмент спектра
ЯМР ^1H соединения



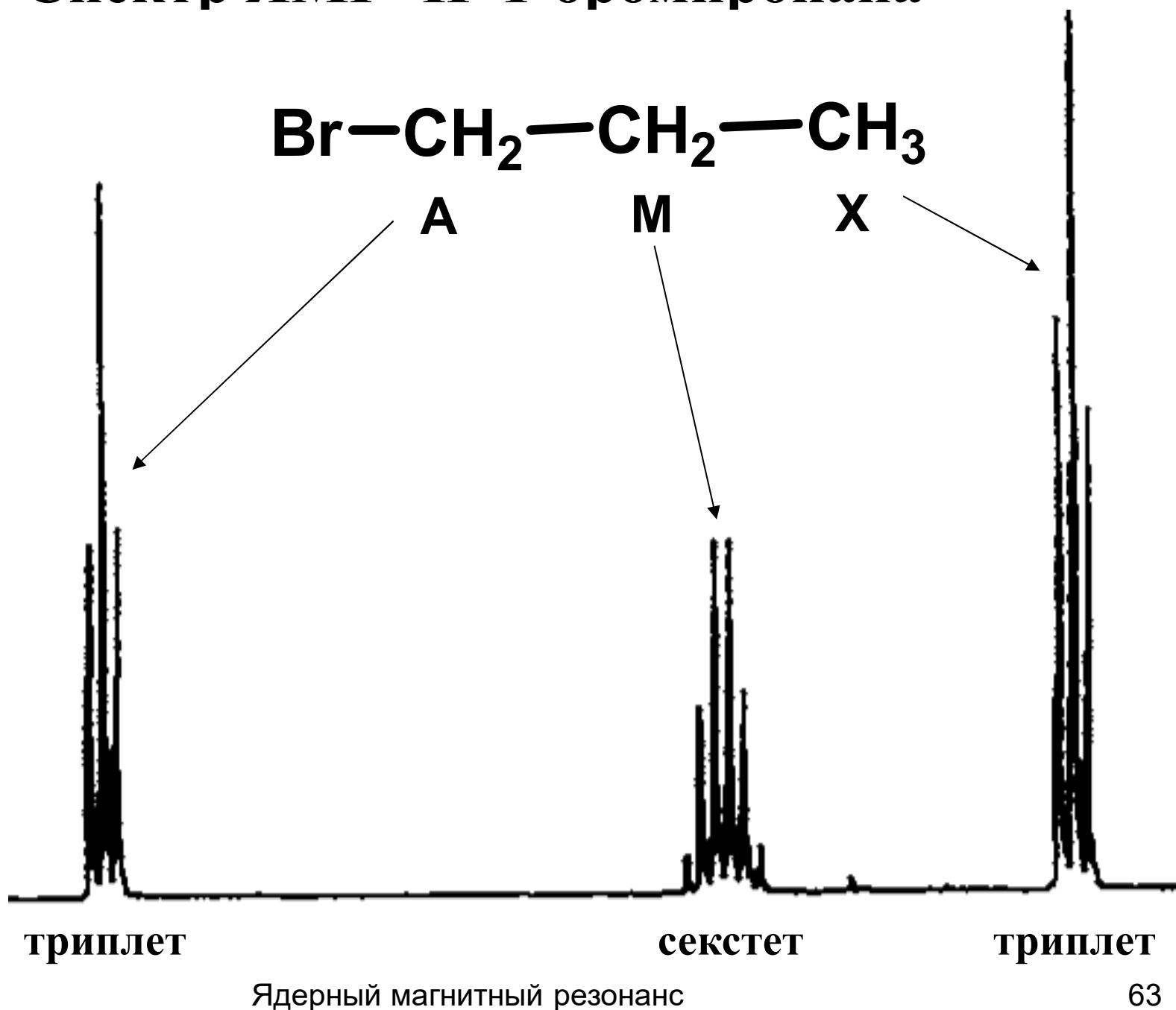
Если данная группа ядер связана спин-спиновым взаимодействием с несколькими различными группами ядер, то мультиплетность её сигнала определяется как произведение мультиплетностей от каждой соседней группы.

Для трёхспиновой системы АМХ:

$$M_M = M_{AM} \times M_{XM} = (N_A + 1) \times (N_X + 1) = (1+1) \times (1+1) = 4$$

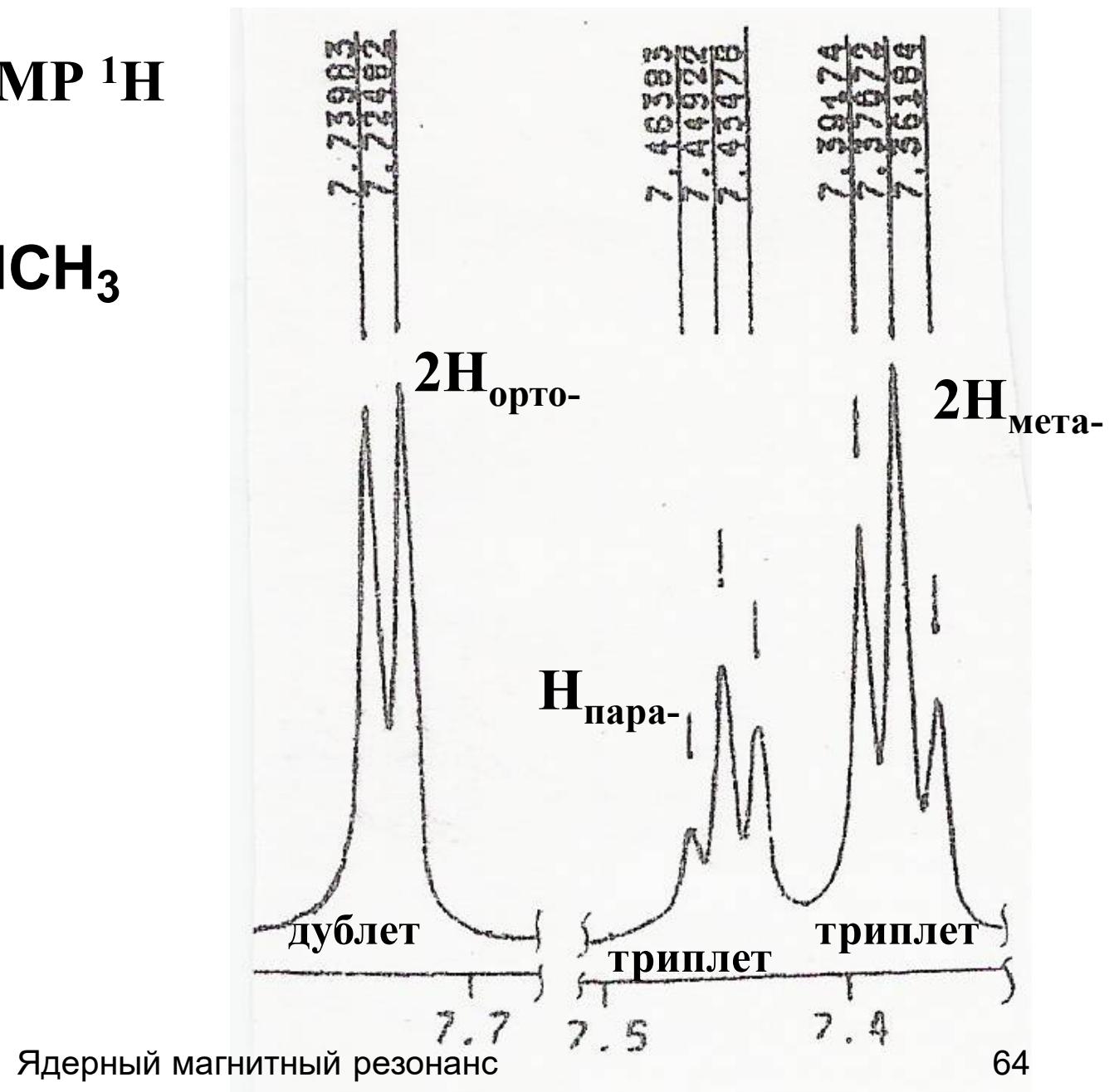
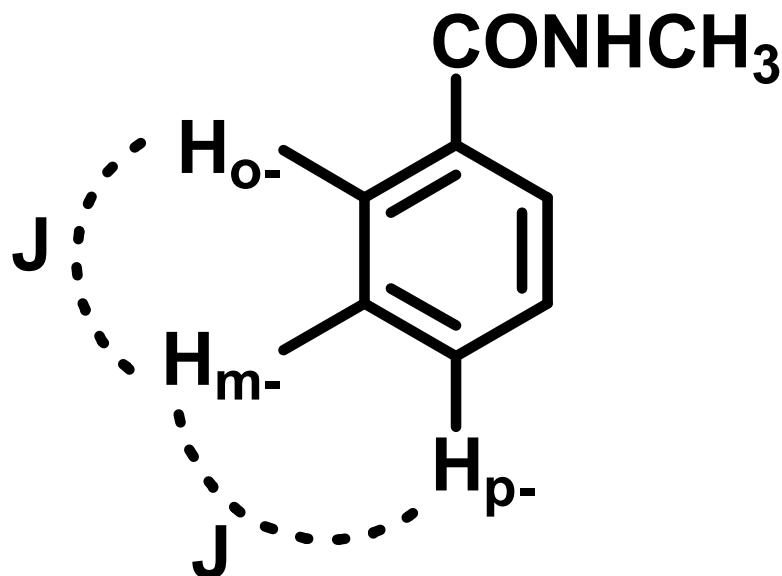
дублет дублетов

Спектр ЯМР ^1H 1-бромпропана



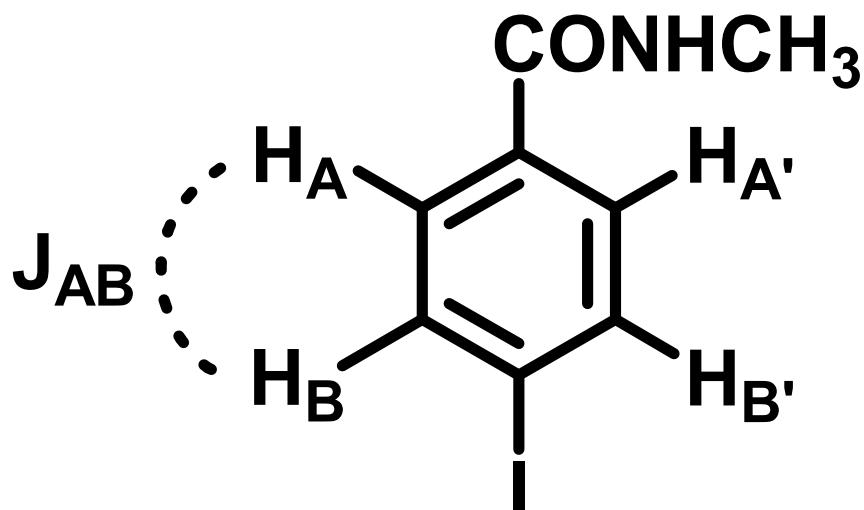
Фенильное кольцо — C_6H_5 в спектрах ПМР

Фрагмент спектра ЯМР 1H
N-метилбензамида.



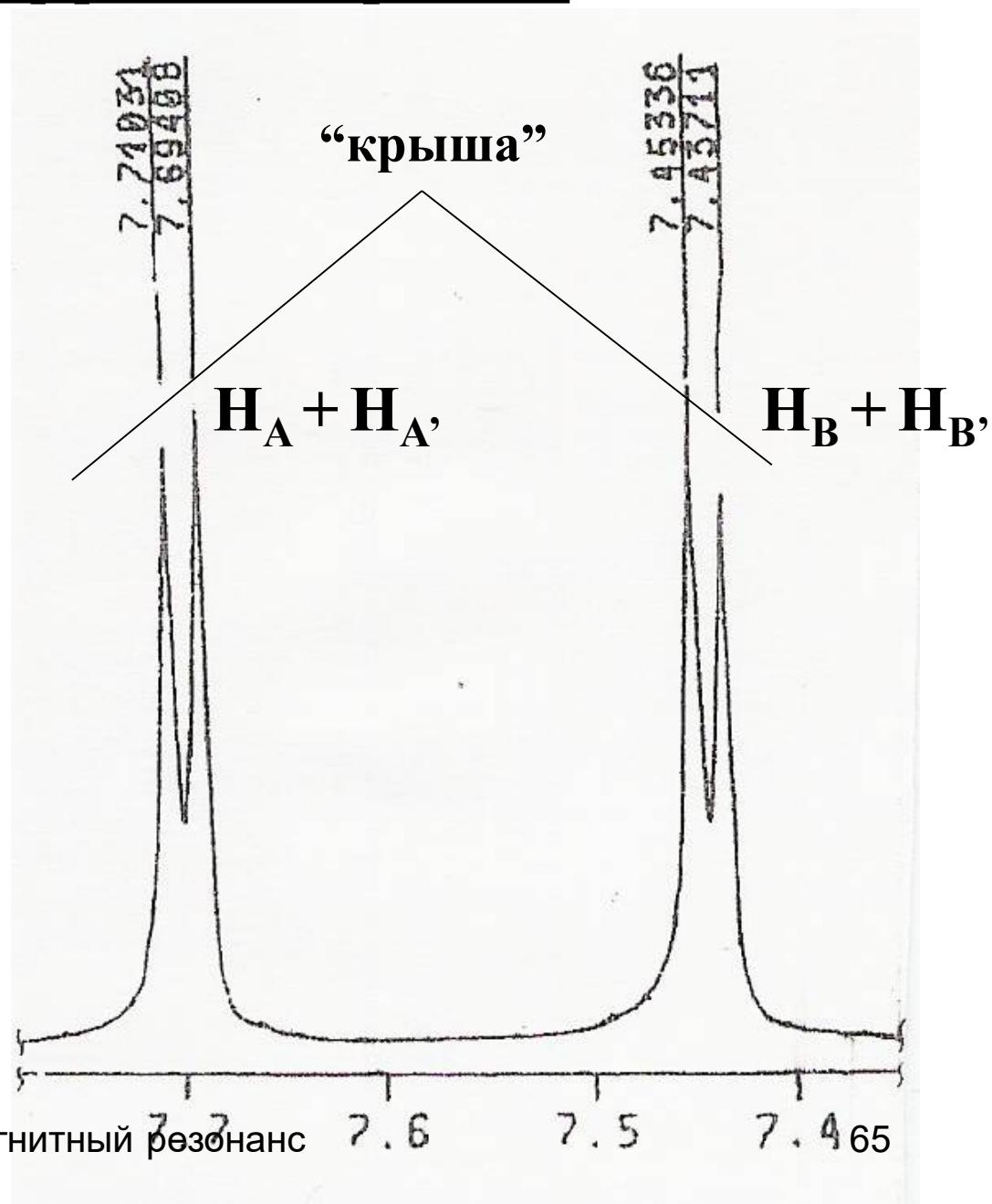
Пара-замещённая бензольная система в спектрах ПМР – два дублета с эффектом “крыши”

Фрагмент спектра
ЯМР ^1H соединения.

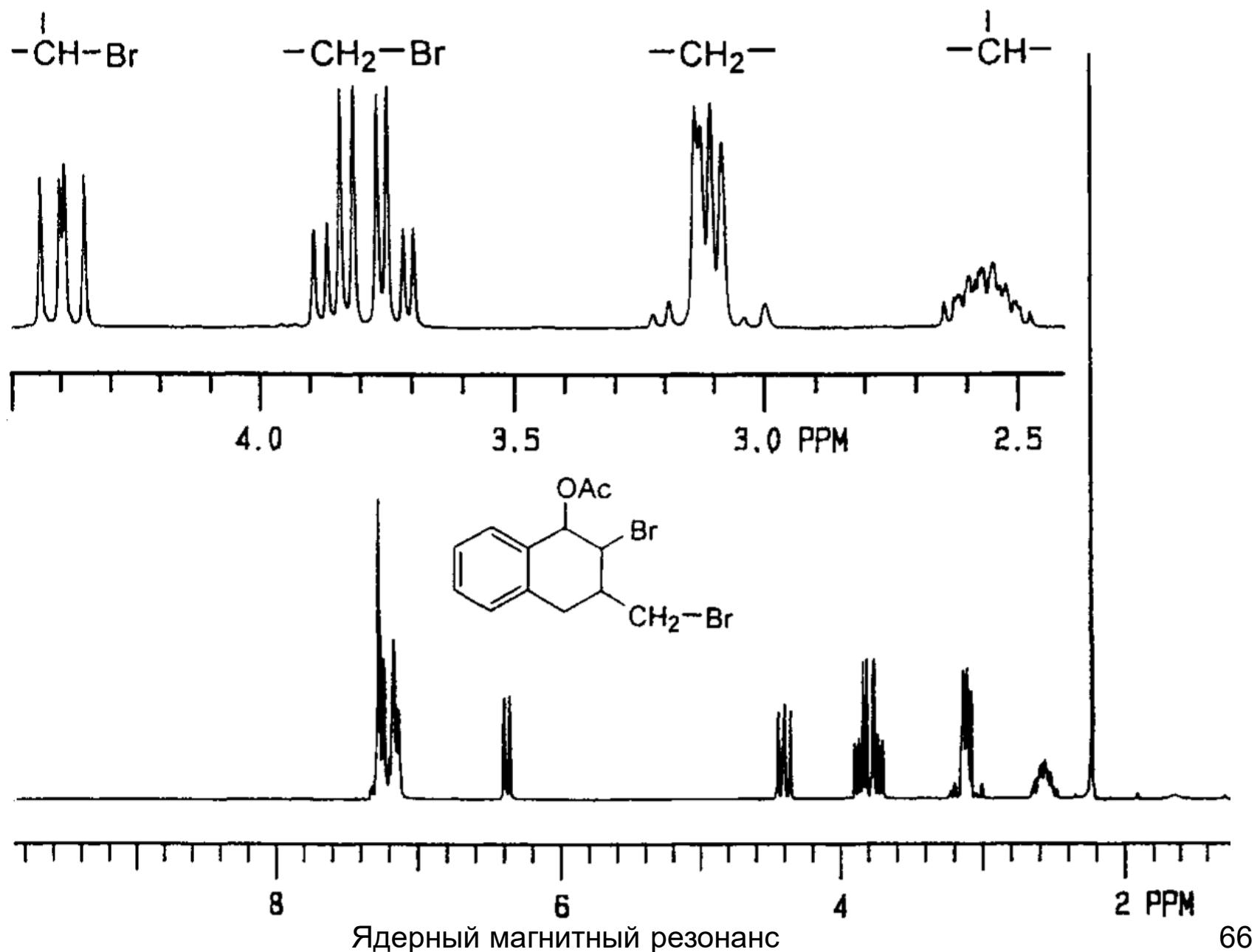


спиновая
система
AA'BB'

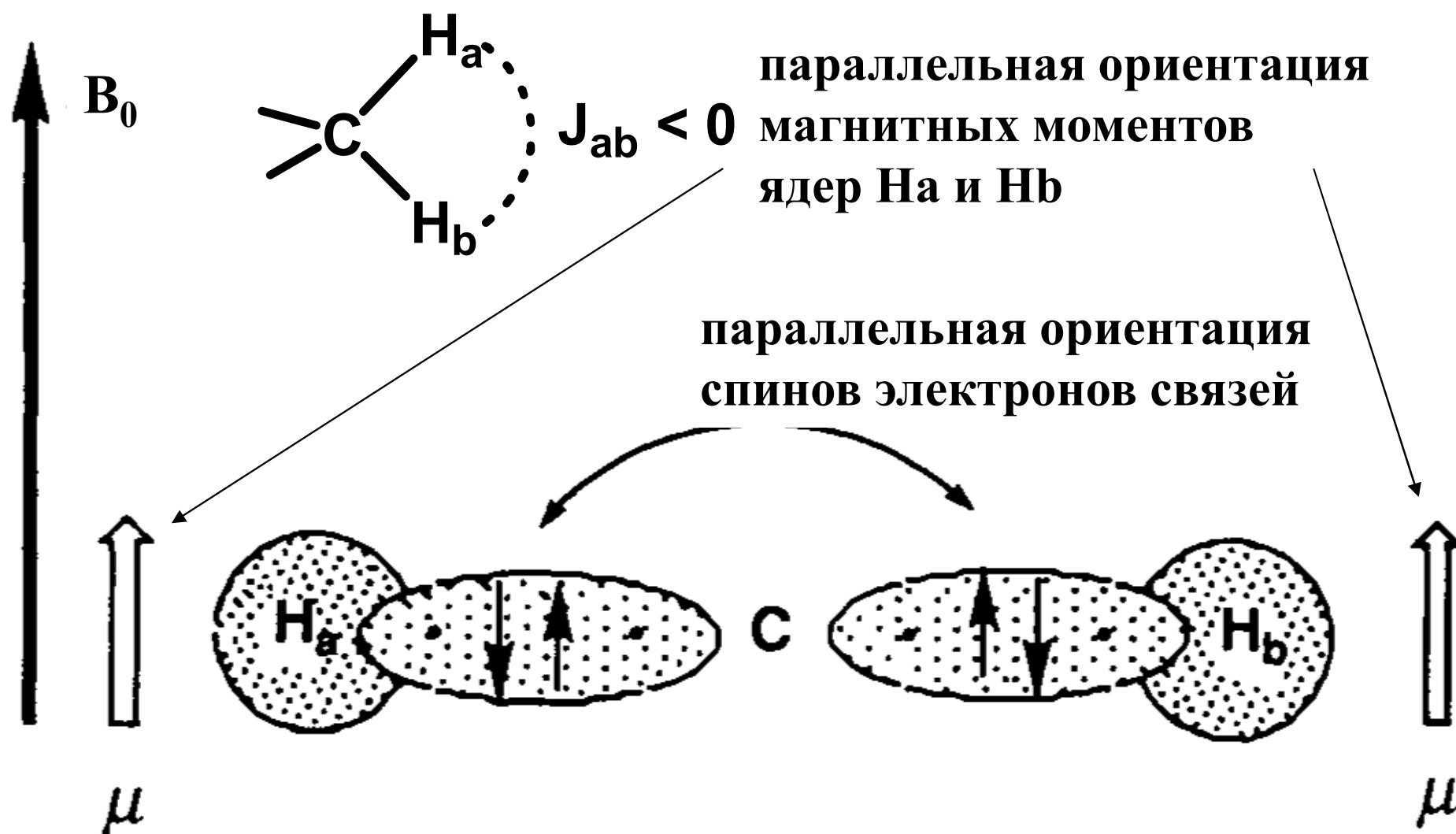
Ядерный магнитный резонанс

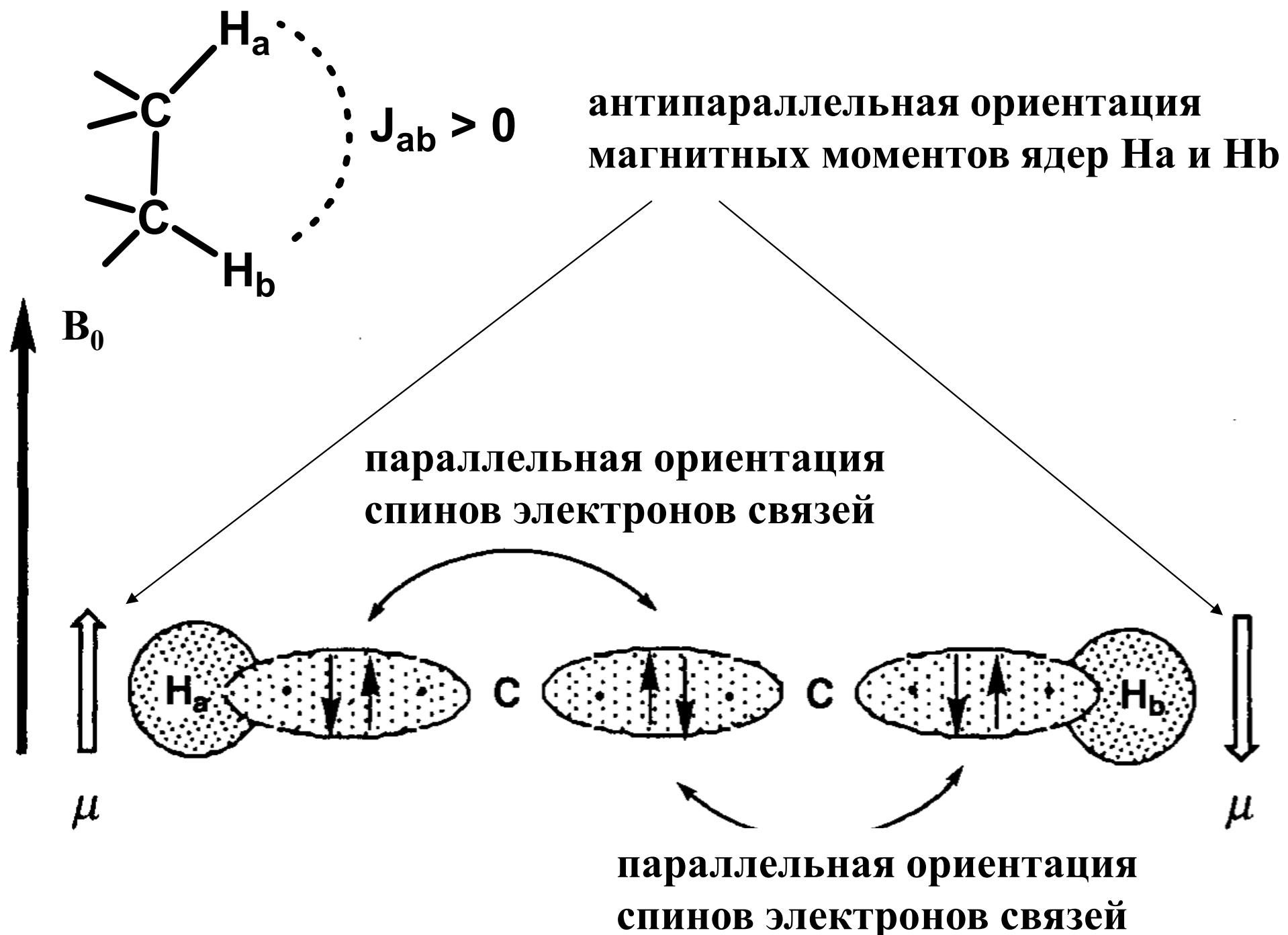


Спектр ЯМР ^1H соединения



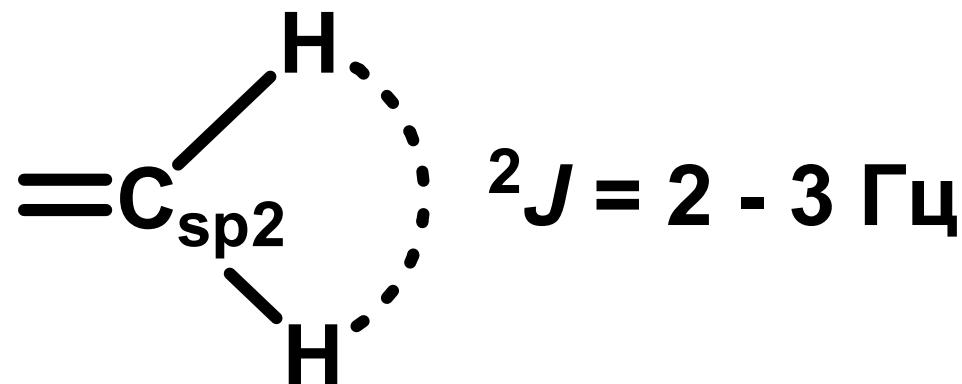
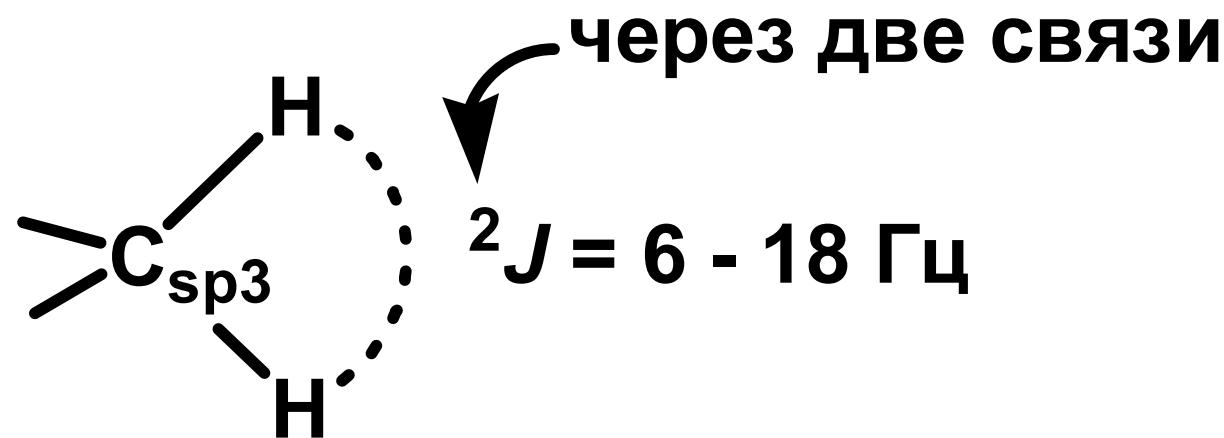
Механизм передачи спин-спинового взаимодействия по системе химических связей



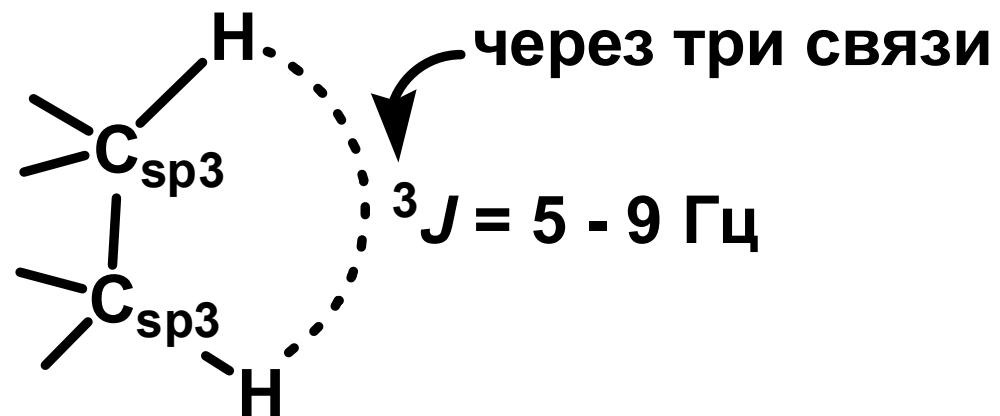


Численные значения констант спин-спинового взаимодействия протонов

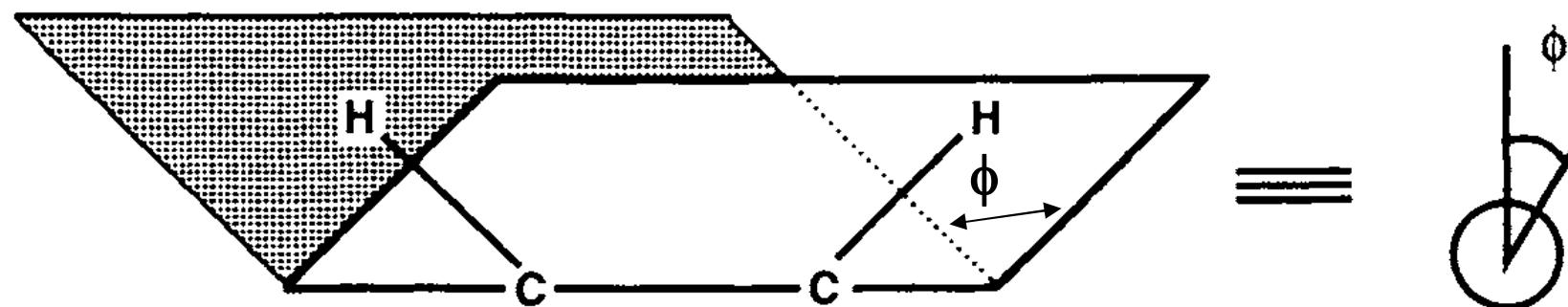
1. Геминальные константы ССВ



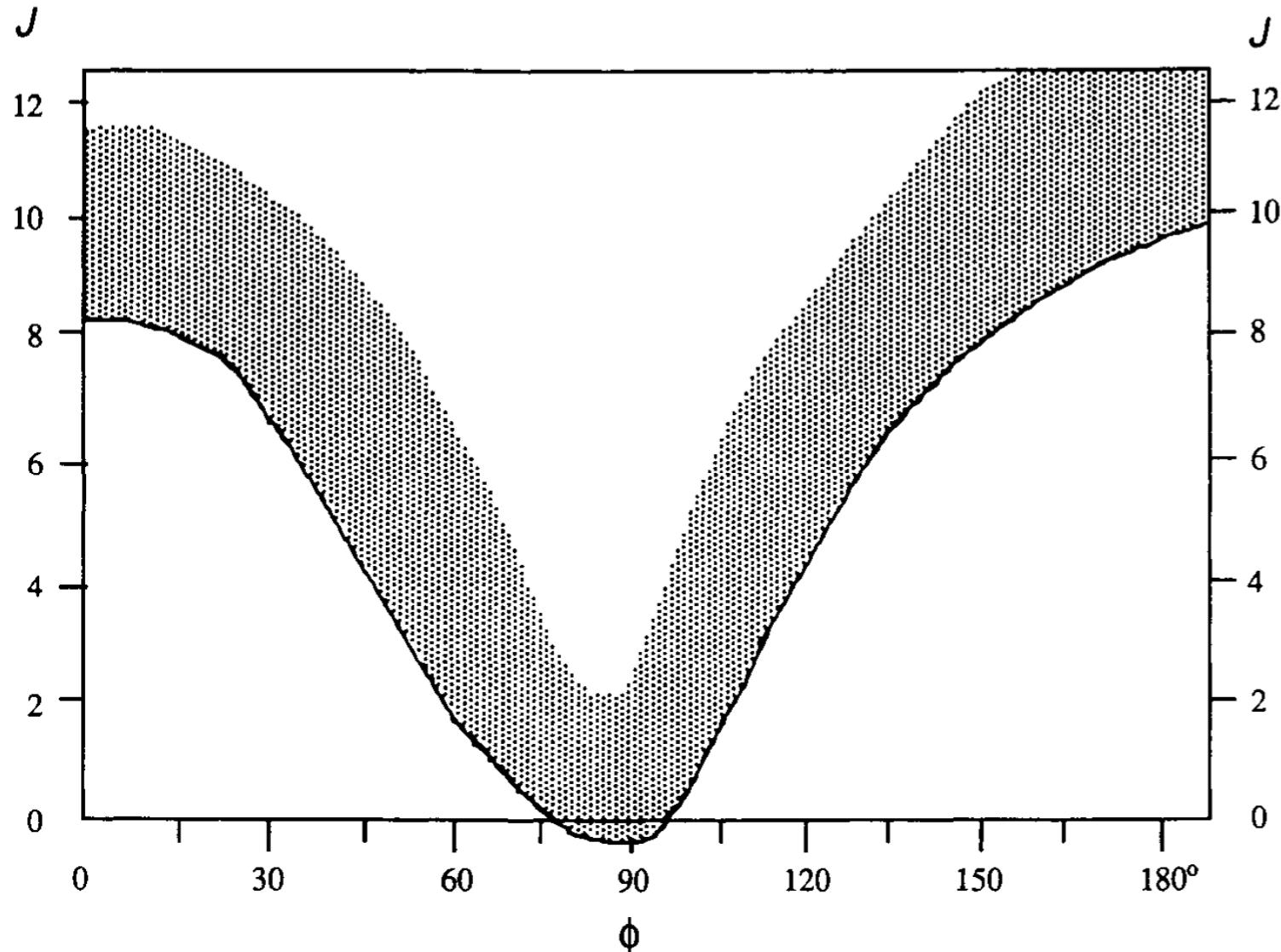
2. Вицинальные константы ССВ

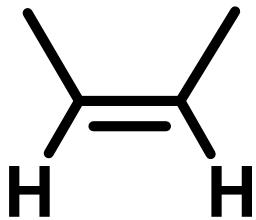


Константа 3J зависит от диэдрального угла ϕ .



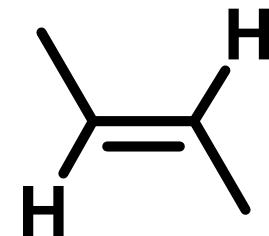
Кривая Карплуса-Конроя – зависимость 3J от ϕ





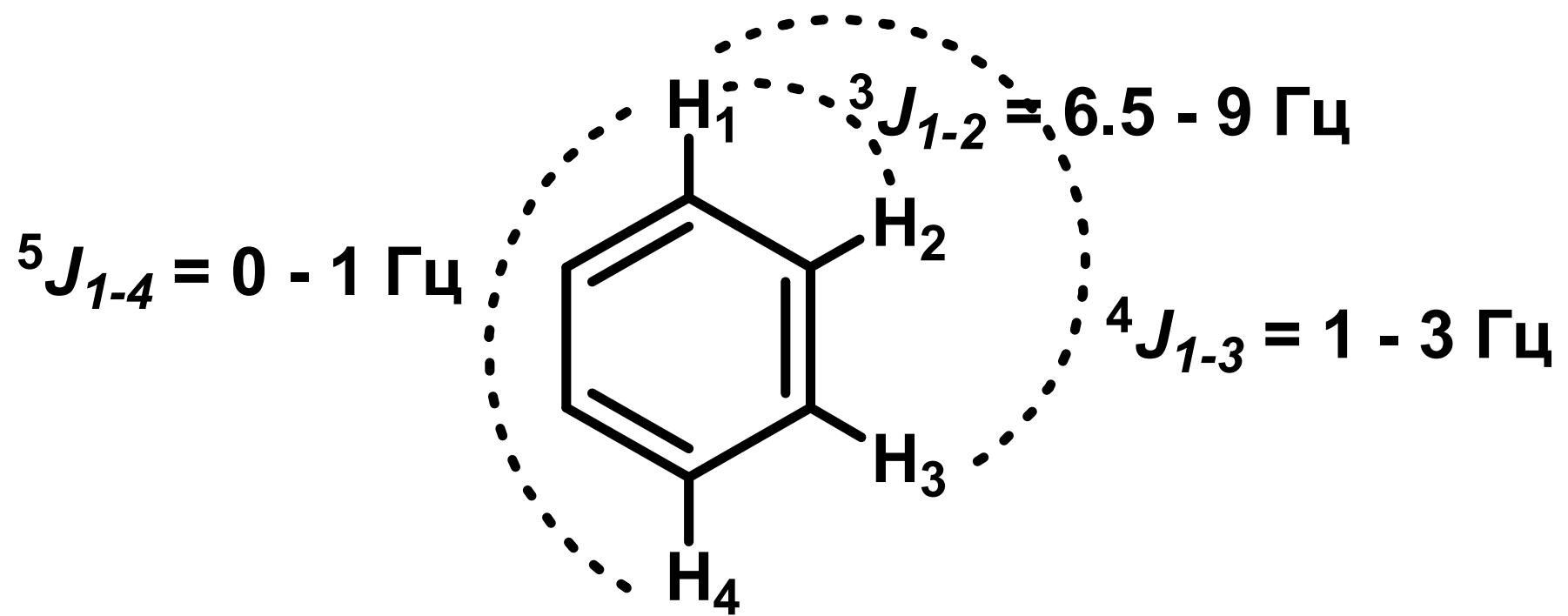
$$^3J_{cис-} = 8 - 12 \text{ Гц} < ^3J_{транс-} = 10 - 18 \text{ Гц}$$

$$\phi = 0$$



$$\phi = 180$$

Константы ССВ в ароматических системах



Спектроскопия ЯМР на ядрах углерода ^{13}C

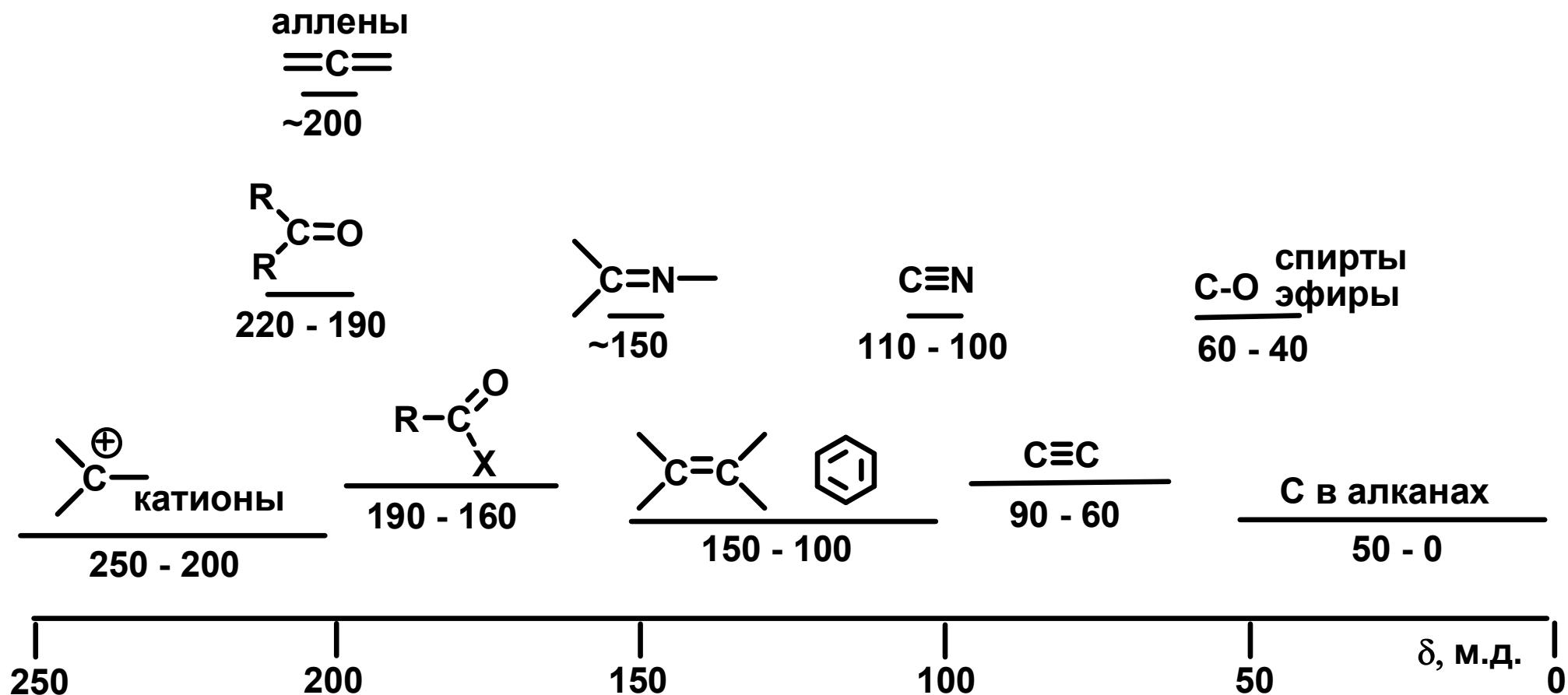
Изотоп углерода ^{12}C :
 $I = 0$ (ЯМР не наблюдается).

Изотоп углерода ^{13}C :
 $I = 1/2$; природная распространенность $\sim 1\%$.
Гиromагнитное отношение $\gamma = 6.728 \times 10^7 \text{ с}^{-1}\text{Tл}^{-1}$

Чувствительность в спектроскопии ЯМР ^{13}C меньше, чем в спектроскопии ПМР.

Для регистрации спектра ЯМР ^{13}C необходимо 20 - 100 мг вещества.

Шкала химических сдвигов в ЯМР ^{13}C



В спектроскопии ЯМР ^{13}C регистрируют:

1. Спектры с подавлением спин-спинового взаимодействия с протонами.

Сигналы в спектре ЯМР ^{13}C – синглеты.

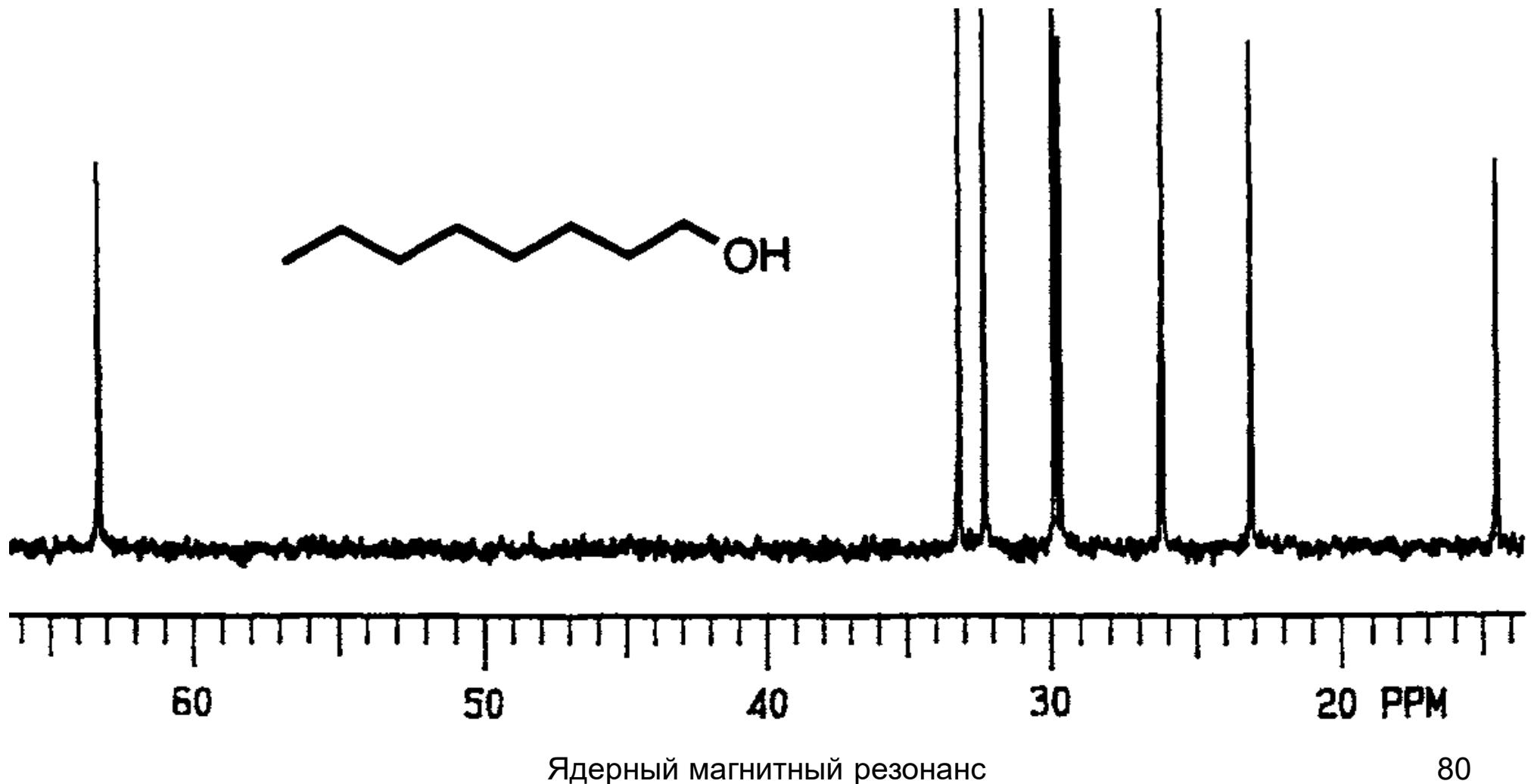
2. Спектры с сохранением спин-спинового взаимодействия с протонами.

Сигналы в спектре ЯМР ^{13}C – мультиплеты.

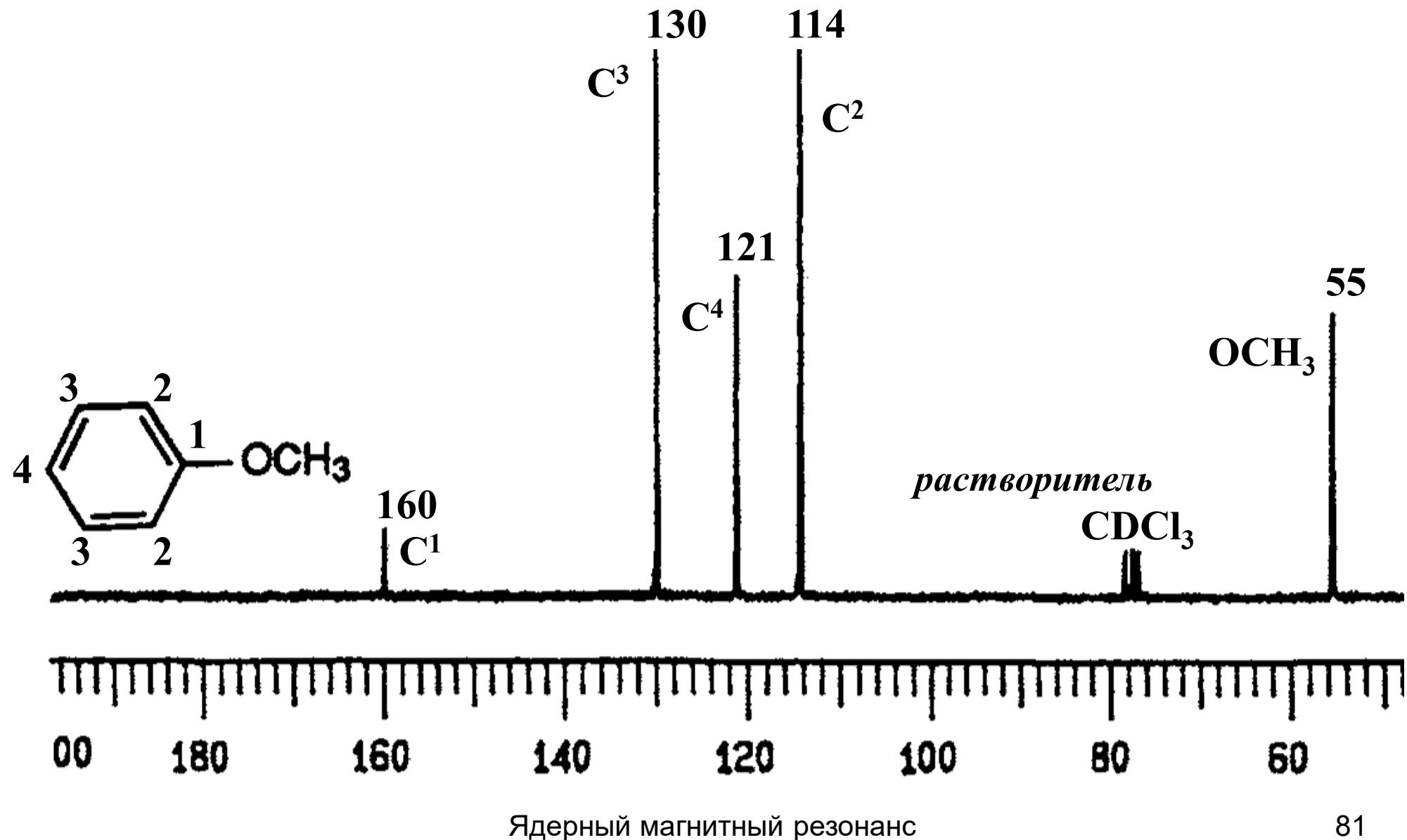
Спектры ЯМР ^{13}C с подавлением спин-спинового взаимодействия с протонами

Спектр ЯМР ^{13}C октанола-1

В структуре – 8 атомов углерода;
в спектре – 8 сигналов.



Спектр ЯМР ^{13}C анизола

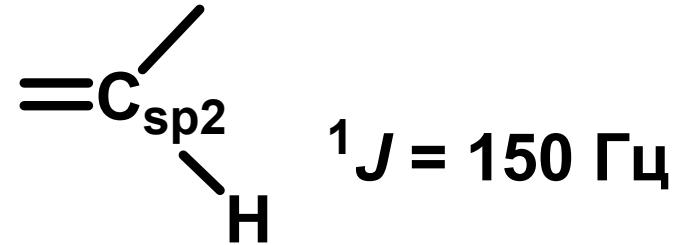
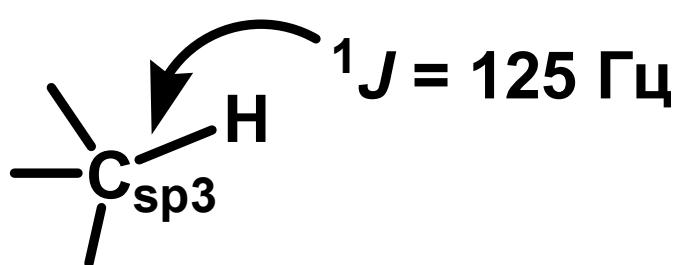
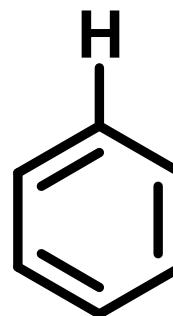


Спектры ЯМР ^{13}C с сохранением (без подавления) спин-спинового взаимодействия с протонами

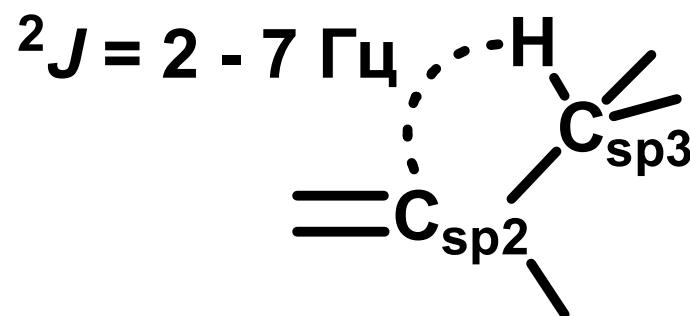
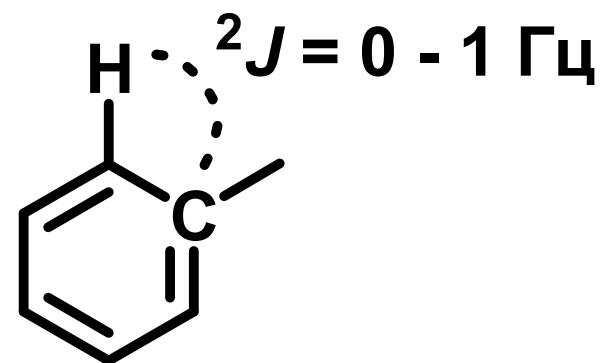
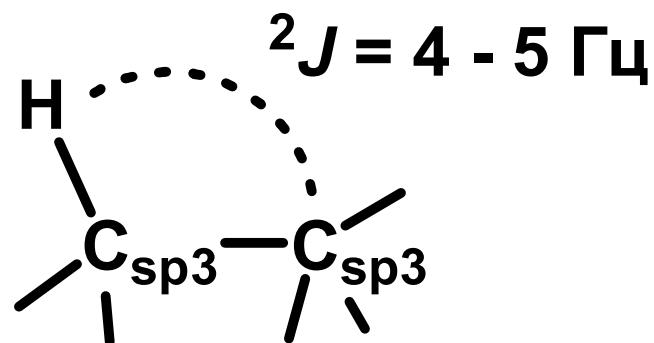
Константы спин-спинового взаимодействия

ядер углерода ^{13}C с протонами

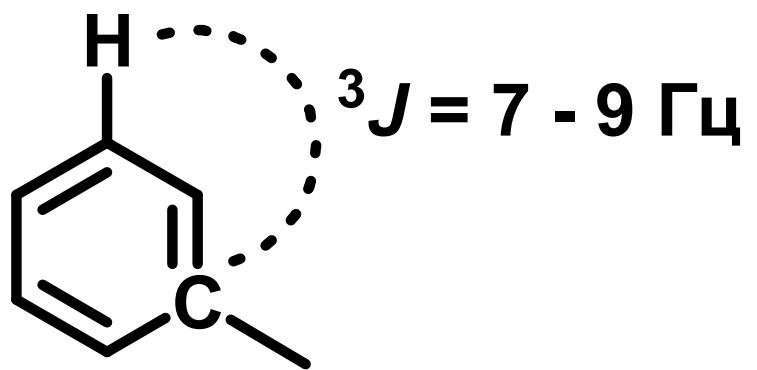
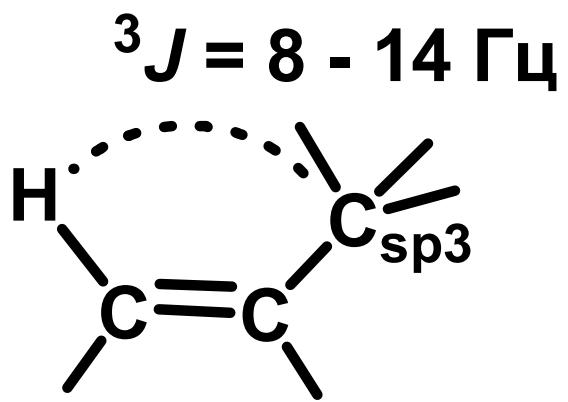
1. Прямые константы ССВ $^1J_{CH}$


$${}^1J = 250 \text{ Гц}$$

$${}^1J = 160 \text{ Гц}$$

2. Константы $^2J_{CH}$



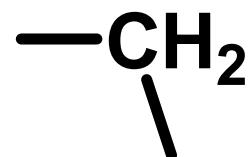
3. Константы ${}^3J_{CH}$



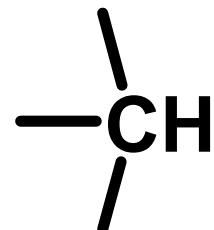
Мультиплетность сигналов в спектрах ЯМР ^{13}C с сохранением ССВ с протонами



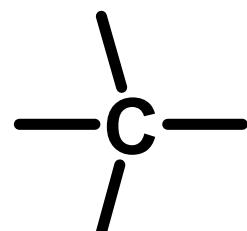
квартет



триплет

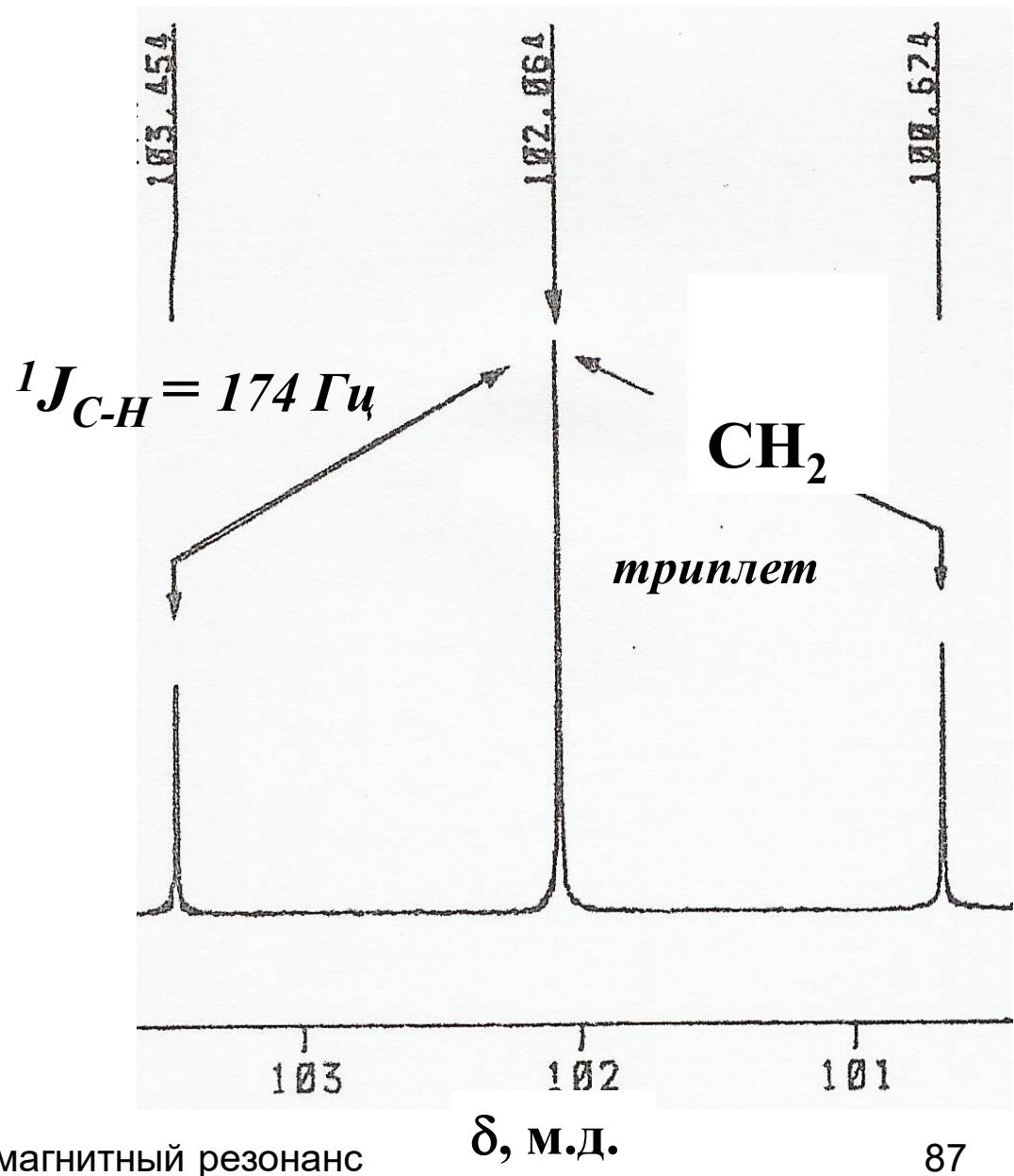
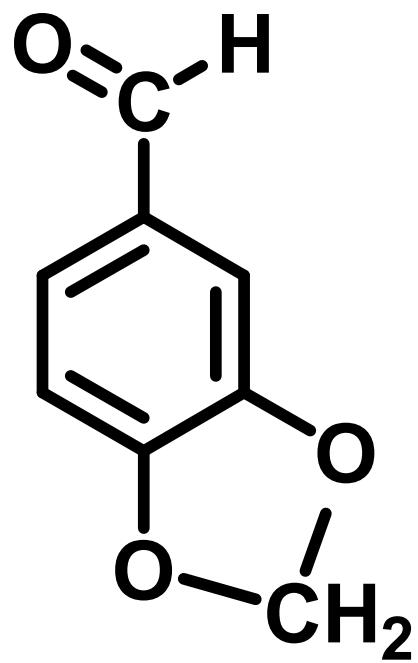


дублет



синглет

Фрагмент спектра ЯМР ^{13}C пипероналя

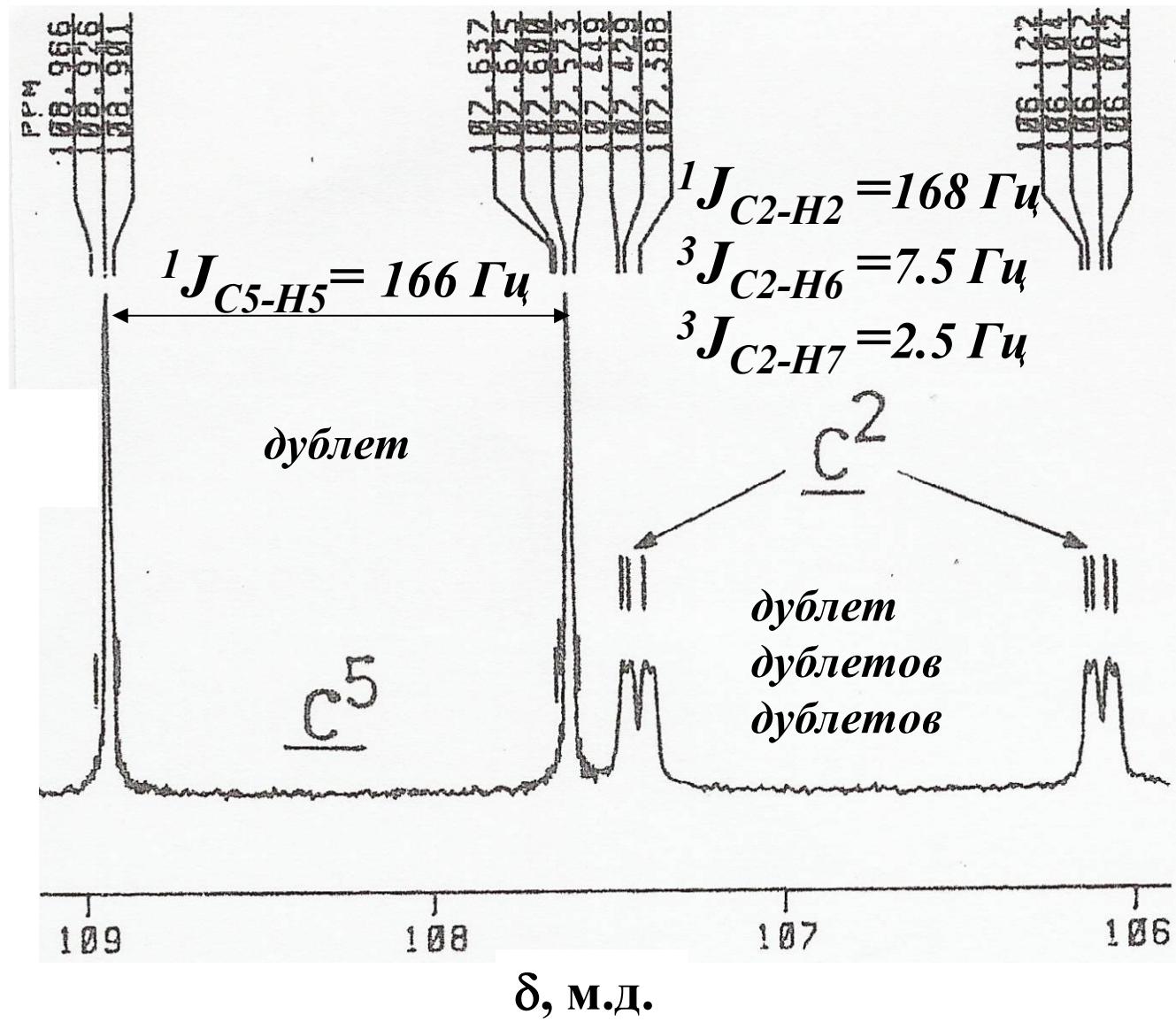
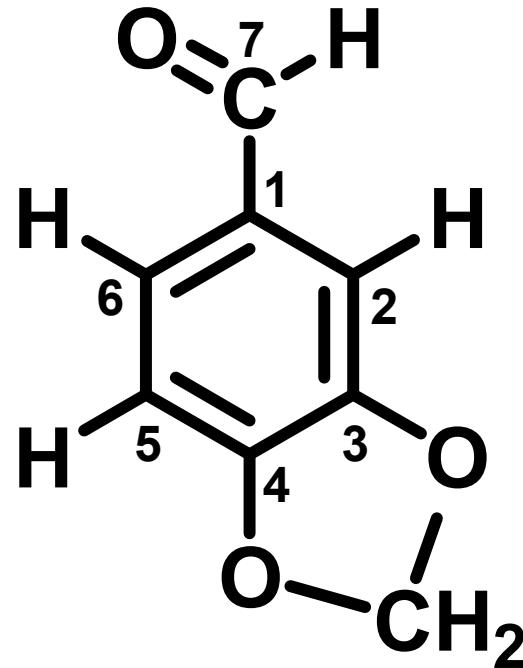


Ядерный магнитный резонанс

$\delta, \text{ М.Д.}$

87

Фрагмент спектра ЯМР ^{13}C пипероналя



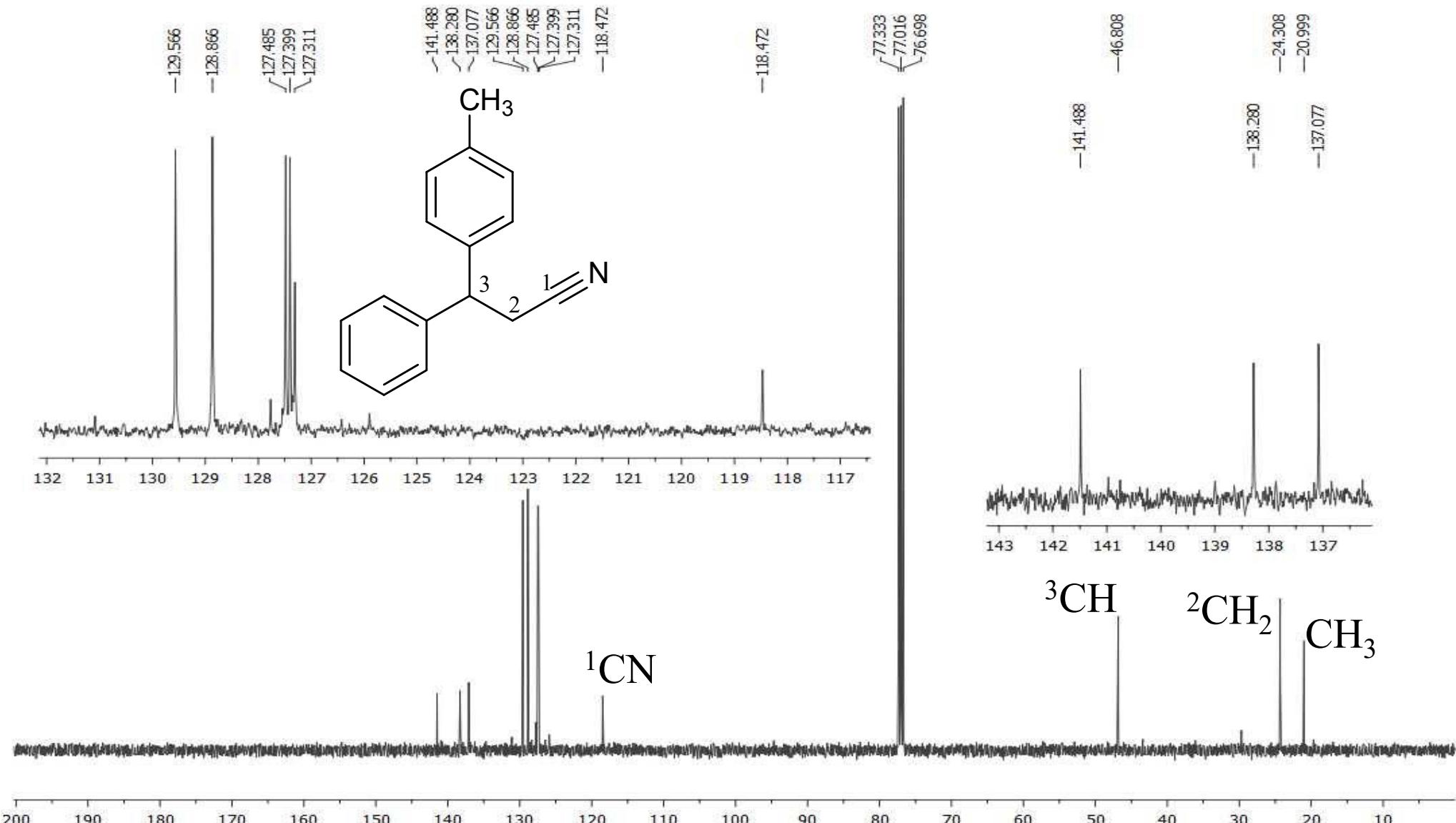
Метод DEPT-135

DEPT («Distortionless Enhancement by Polarization Transfer») – неискаженное усиление путем переноса поляризации

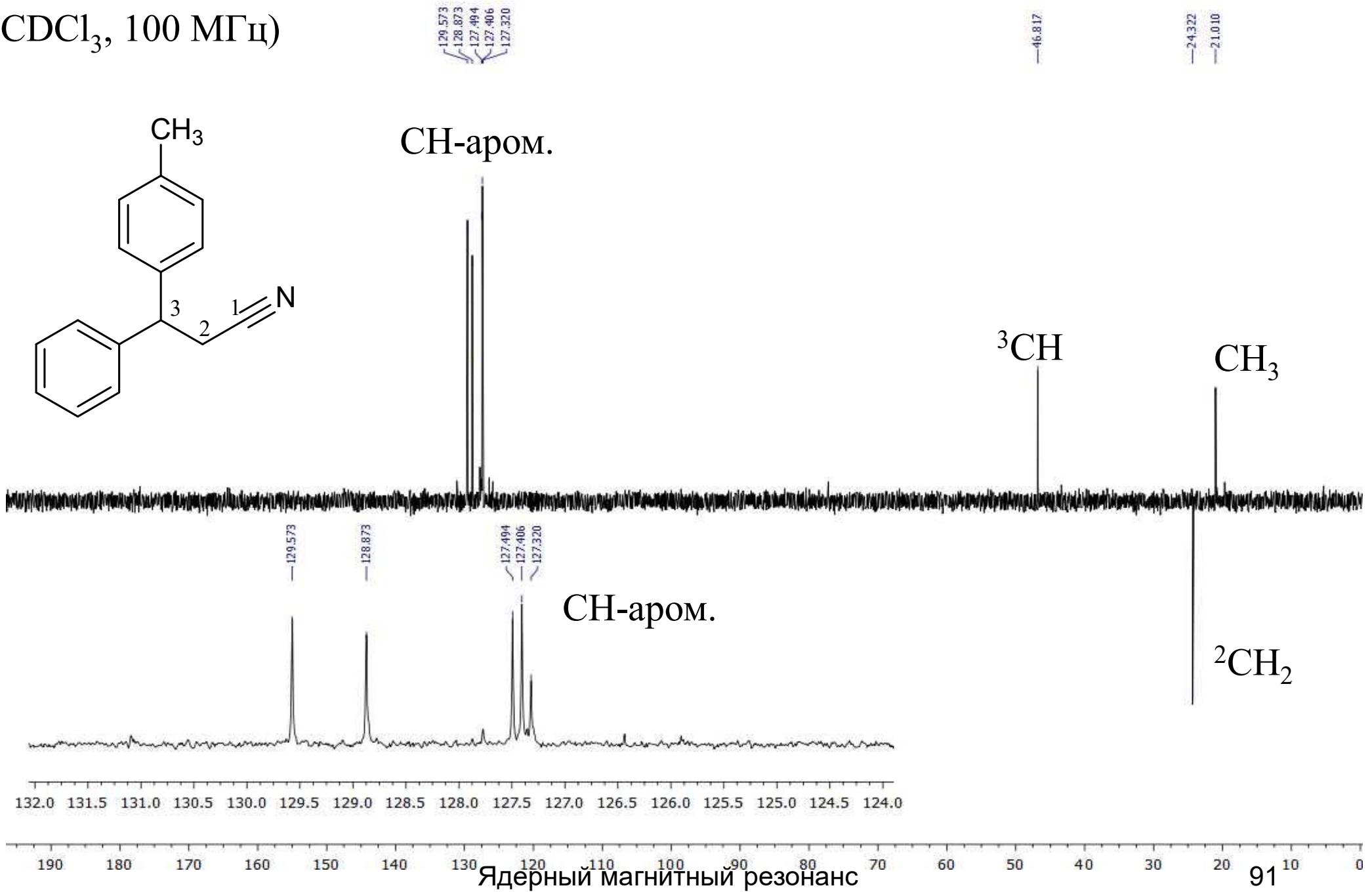
Специальная последовательность радиочастотных импульсов в ЯМР, приводящая к появлению:

- положительных сигналов ядер атомов ^{13}C , имеющих нечетное число протонов, - групп CH и CH_3 ;
- отрицательных сигналов ядер атомов ^{13}C , имеющих четное число протонов, - групп CH_2 ;
- исчезновению сигналов ядер атомов ^{13}C , вообще не имеющих протонов, - четвертичных углеродных атомов.

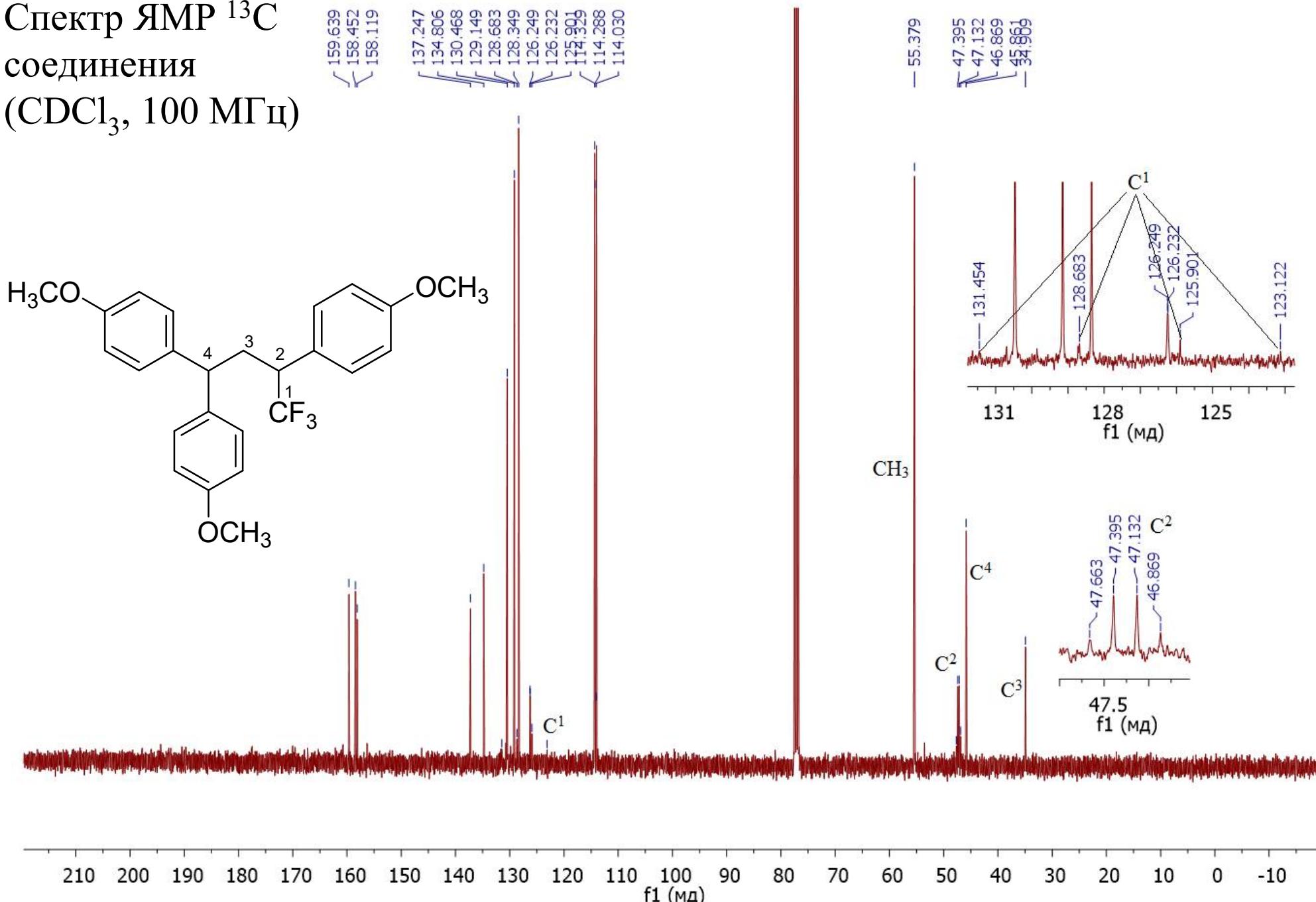
Спектр ЯМР ^{13}C
соединения
(CDCl_3 , 100 МГц)



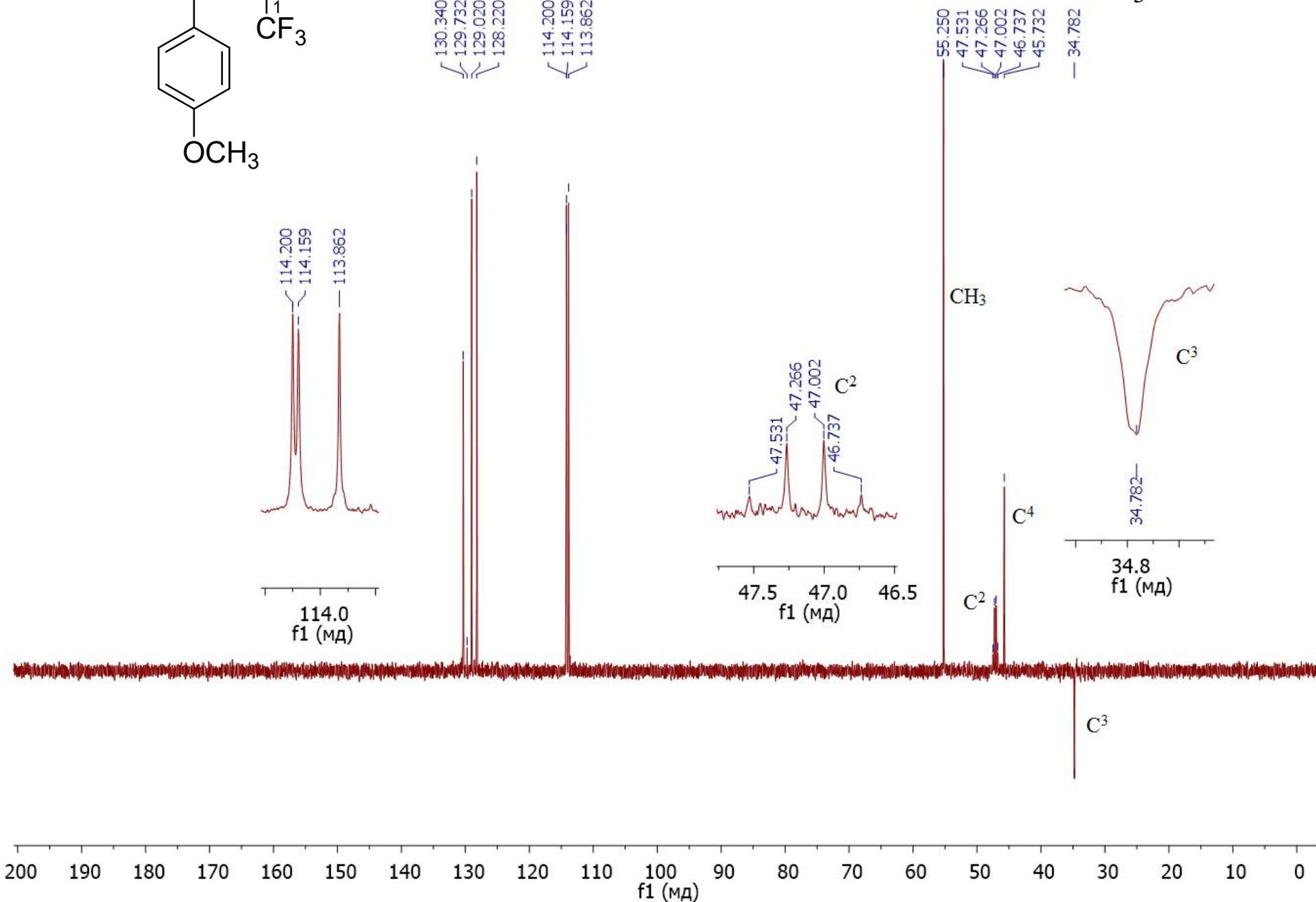
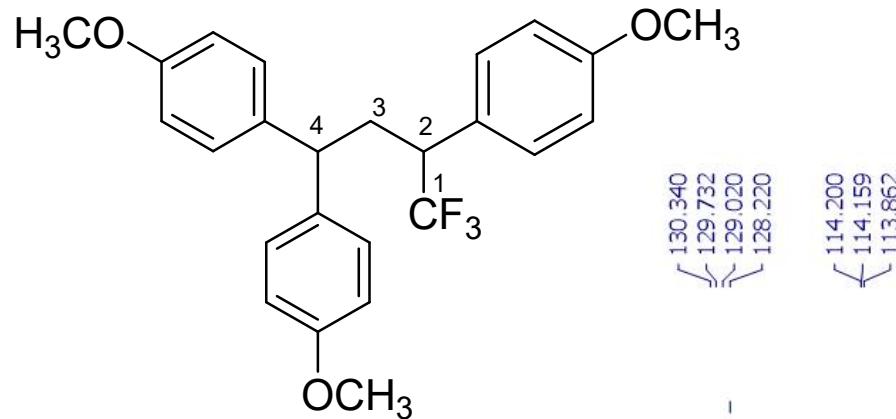
Спектр DEPT
соединения
(CDCl_3 , 100 МГц)



Спектр ЯМР ^{13}C
соединения
(CDCl_3 , 100 МГц)



Ядерный магнитный резонанс



Спектроскопия ЯМР ^{19}F

Ядро атома фтора ^{19}F :

спин $I = 1/2$;

гиромагнитное отношение $\gamma = 2.517 \times 10^8 \text{ с}^{-1}\text{Tл}^{-1}$,

природная распространённость 100%.

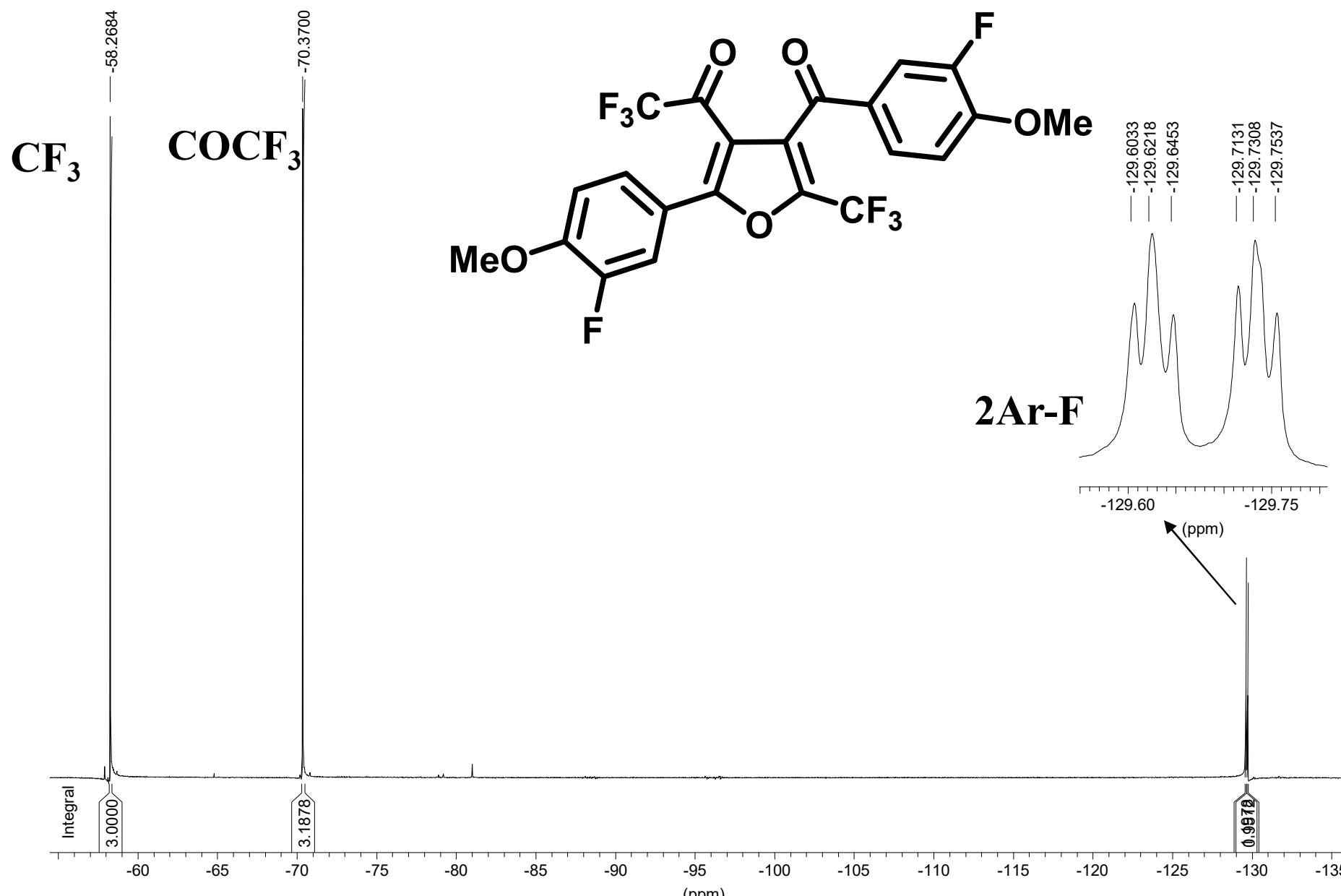
**Для регистрации спектра ЯМР ^{19}F необходимо
1 - 5 мг вещества.**

Шкала химических сдвигов в ЯМР ^{19}F

Стандарт – CFCl_3 с $\delta = 0$ м.д.

Структурный фрагмент	Хим. сдвиг, δ м.д.
$\text{R}-\text{CH}_2\text{F}$	-200 ÷ -230
$-\text{CH}=\text{CF}-$	-120 ÷ -130
ArF	-105 ÷ -130
$-\text{CO}-\text{CF}_3$	-65 ÷ -75
$\text{Ar}-\text{CF}_3$	-55 ÷ -70

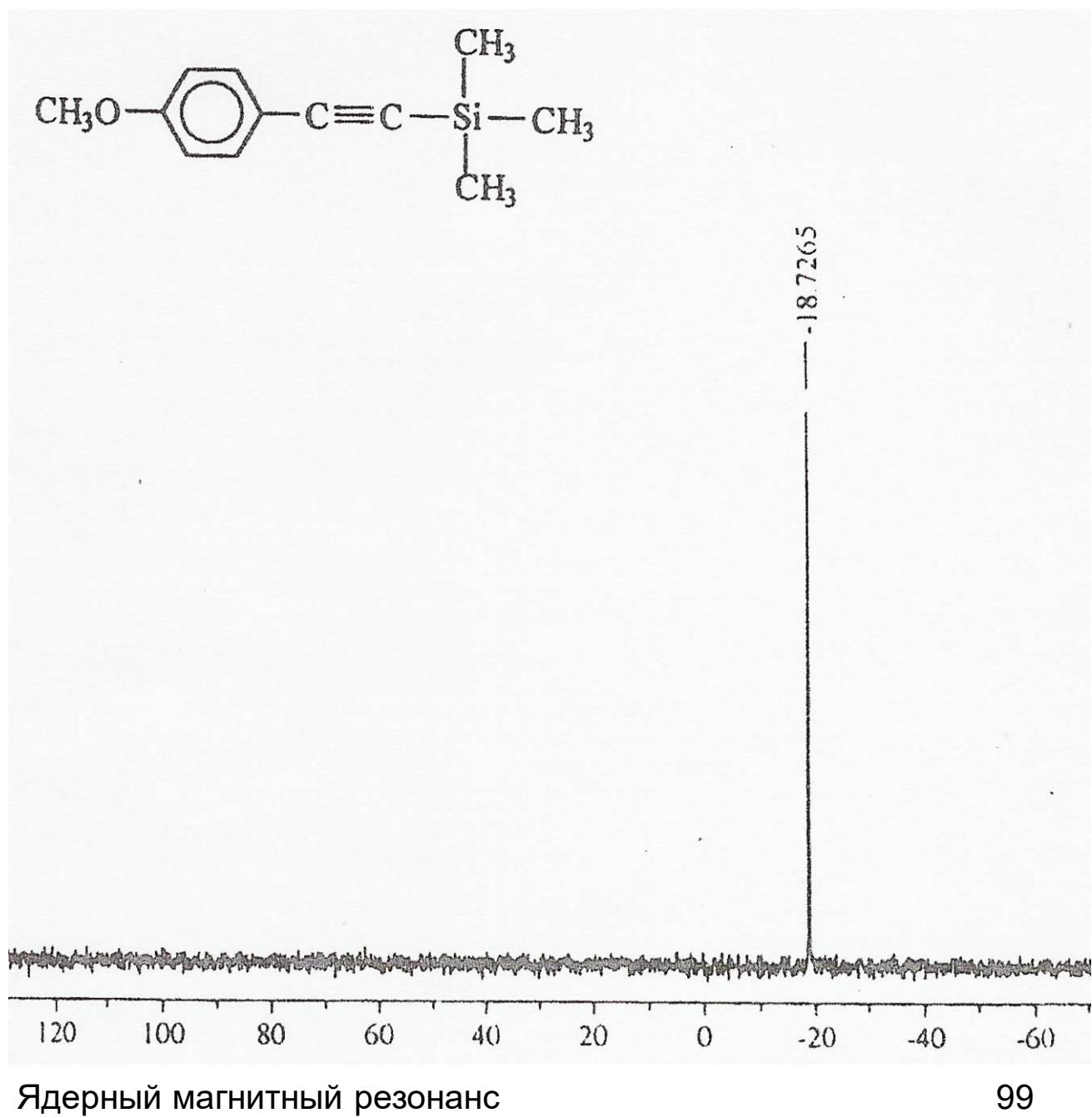
Спектр ЯМР ^{19}F соединения



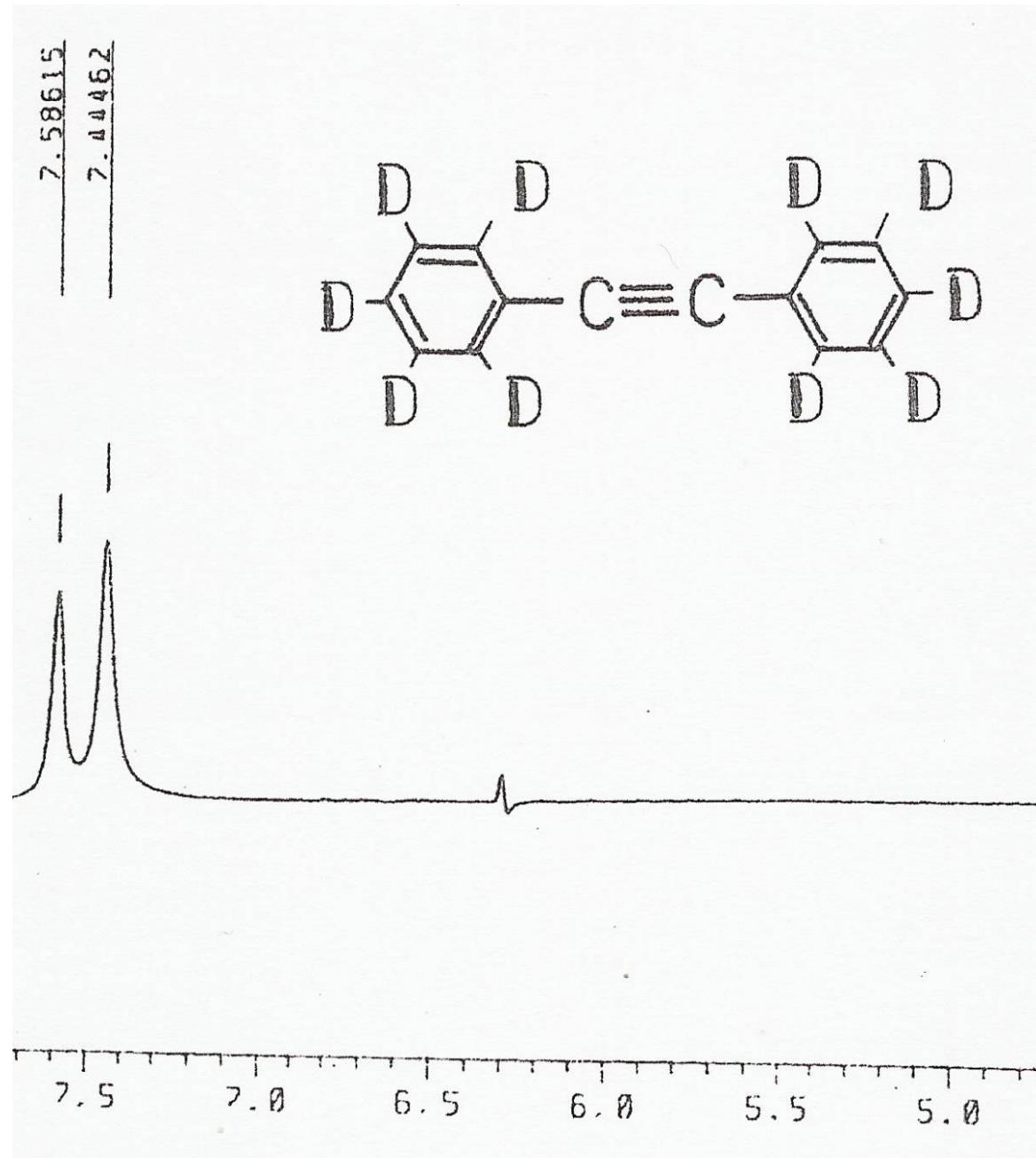
Ядерный магнитный резонанс

Спектроскопия ЯМР на других ядрах: ^{31}P , ^{29}Si , $^2\text{H(D)}$ и пр.

Спектр ЯМР ^{29}Si соединения



Спектр ЯМР $^2\text{H(D)}$ соединения



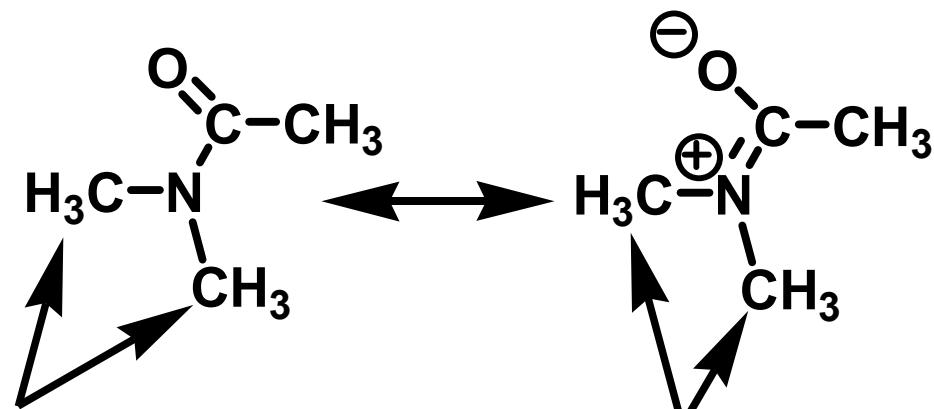
Динамический ЯМР

**Спектроскопия ЯМР – мощный и тонкий
инструмент для наблюдения и
характеристики динамических
внутри- и межмолекулярных
процессов.**

Спектры ЯМР ^1H

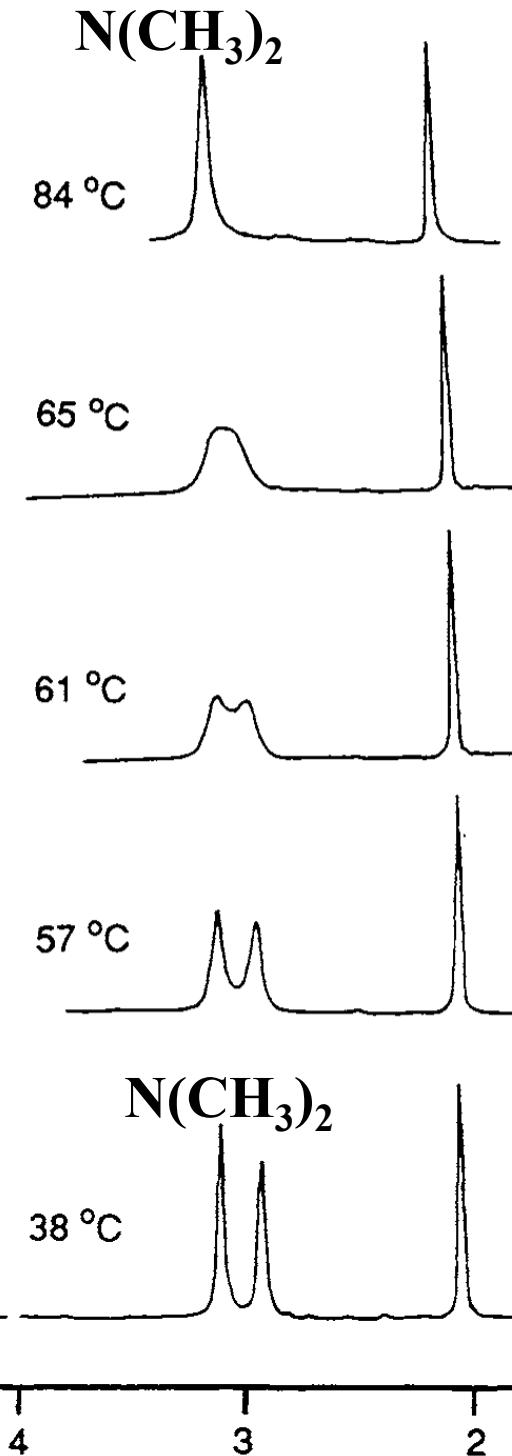
N,N -диметилацетамида

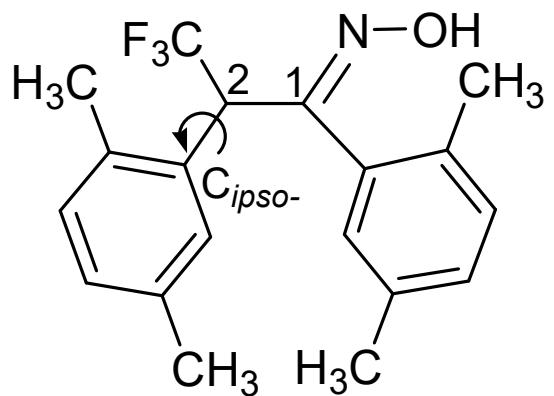
при разных температурах



при высоких температурах метильные группы эквивалентны из-за вращения группы $\text{N}(\text{CH}_3)_2$ вокруг связи $\text{C}(\text{O})-\text{N}$

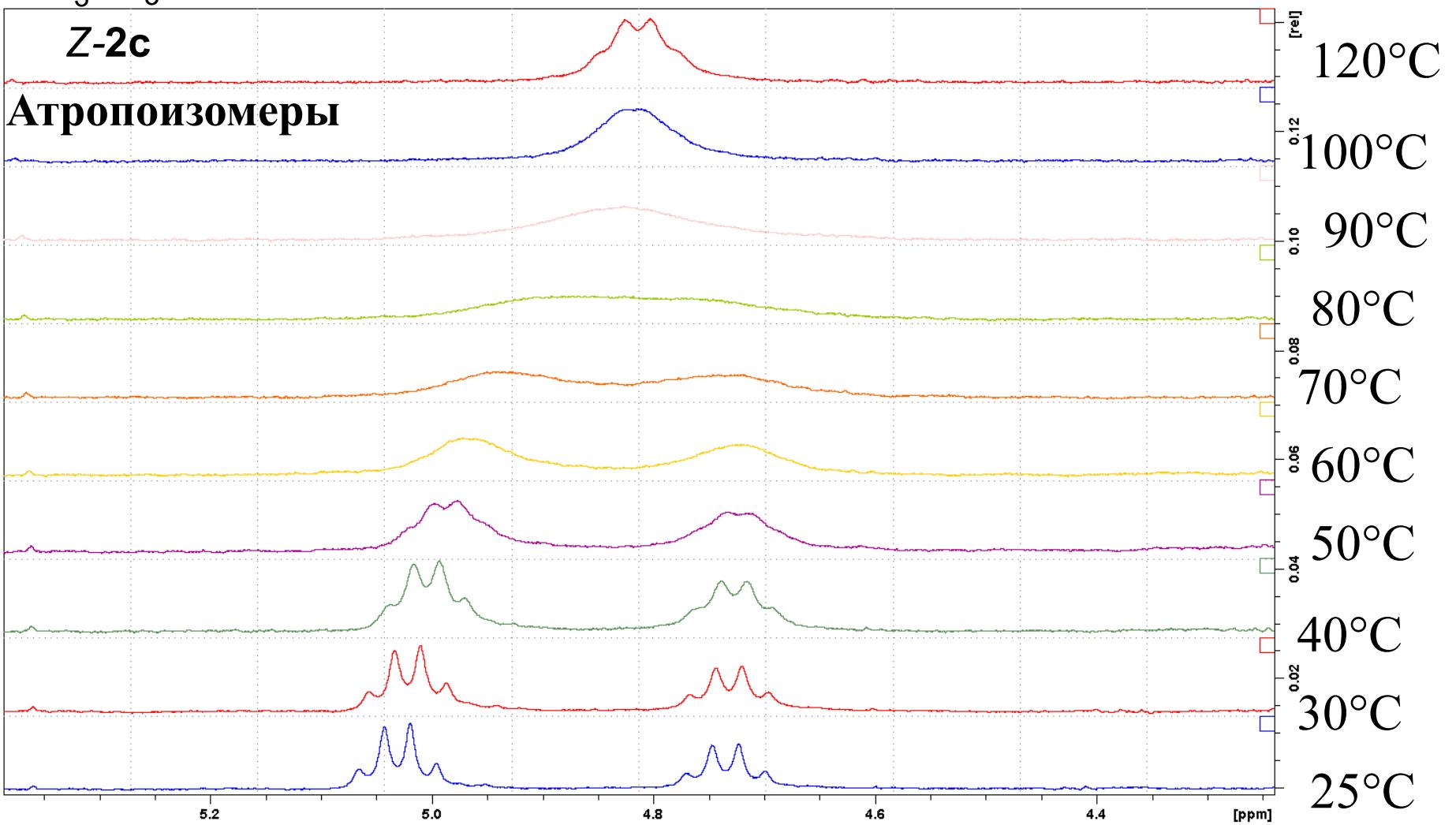
Ядерный магнитный резонанс

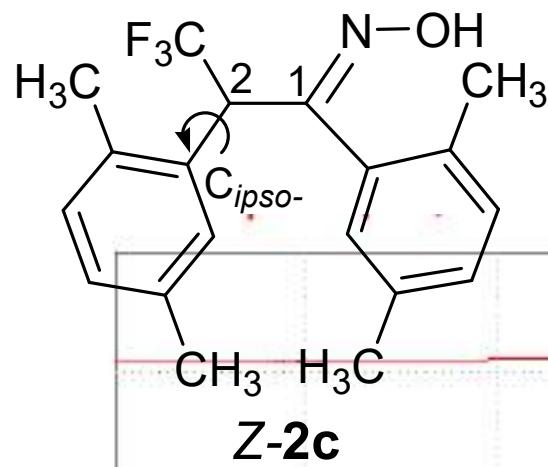




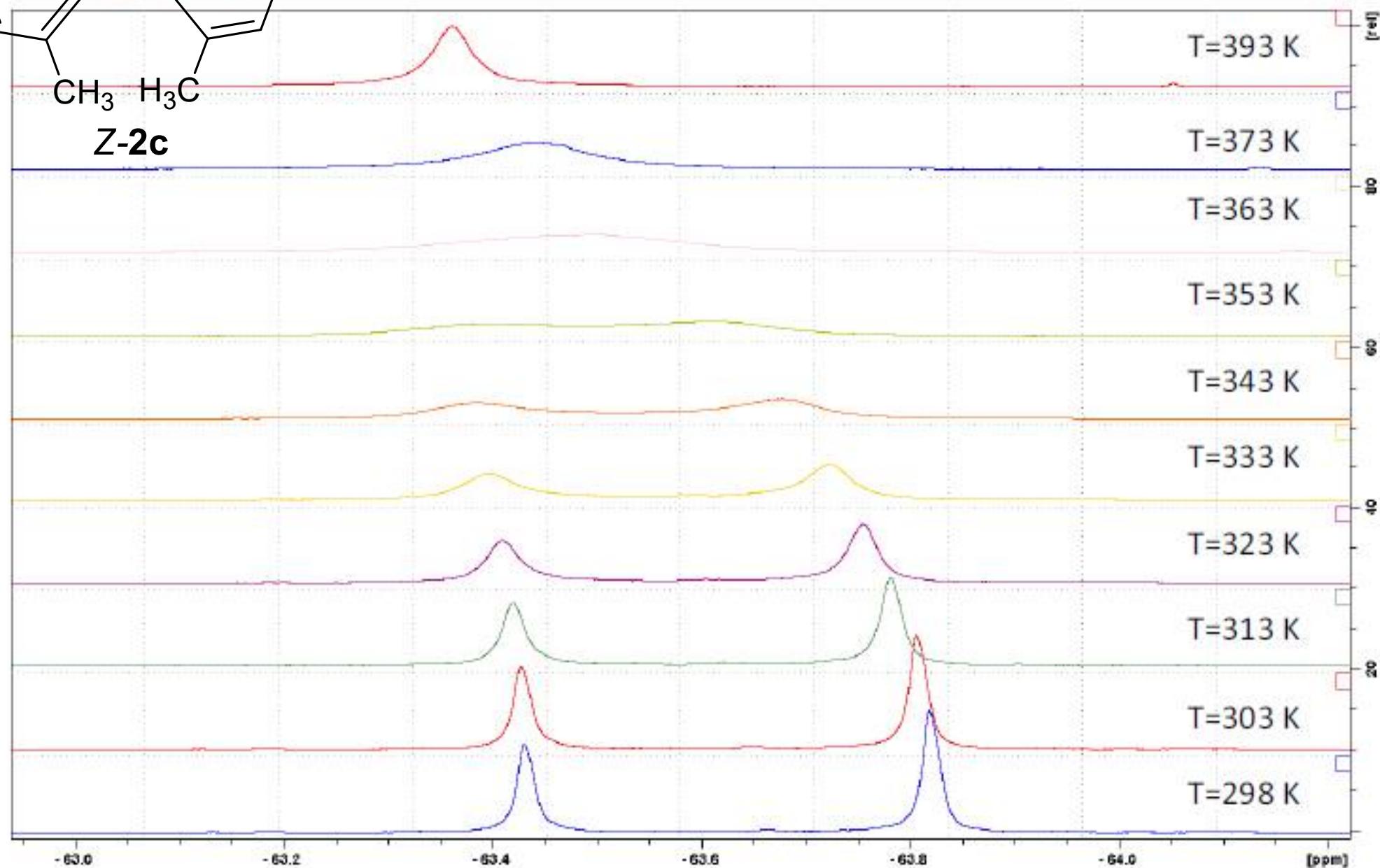
Температура коалесценции $\sim 85^{\circ}\text{C}$
Энергия активации (барьер) вращения 58.6 КДж/моль

Спектры ЯМР ^1H при разных температурах –
сигнал H^2 (DMSO-d_6 , 400 МГц)





Температурная зависимость
ЯМР ^{19}F соединения
(DMSO- d_6 , 370 МГц)

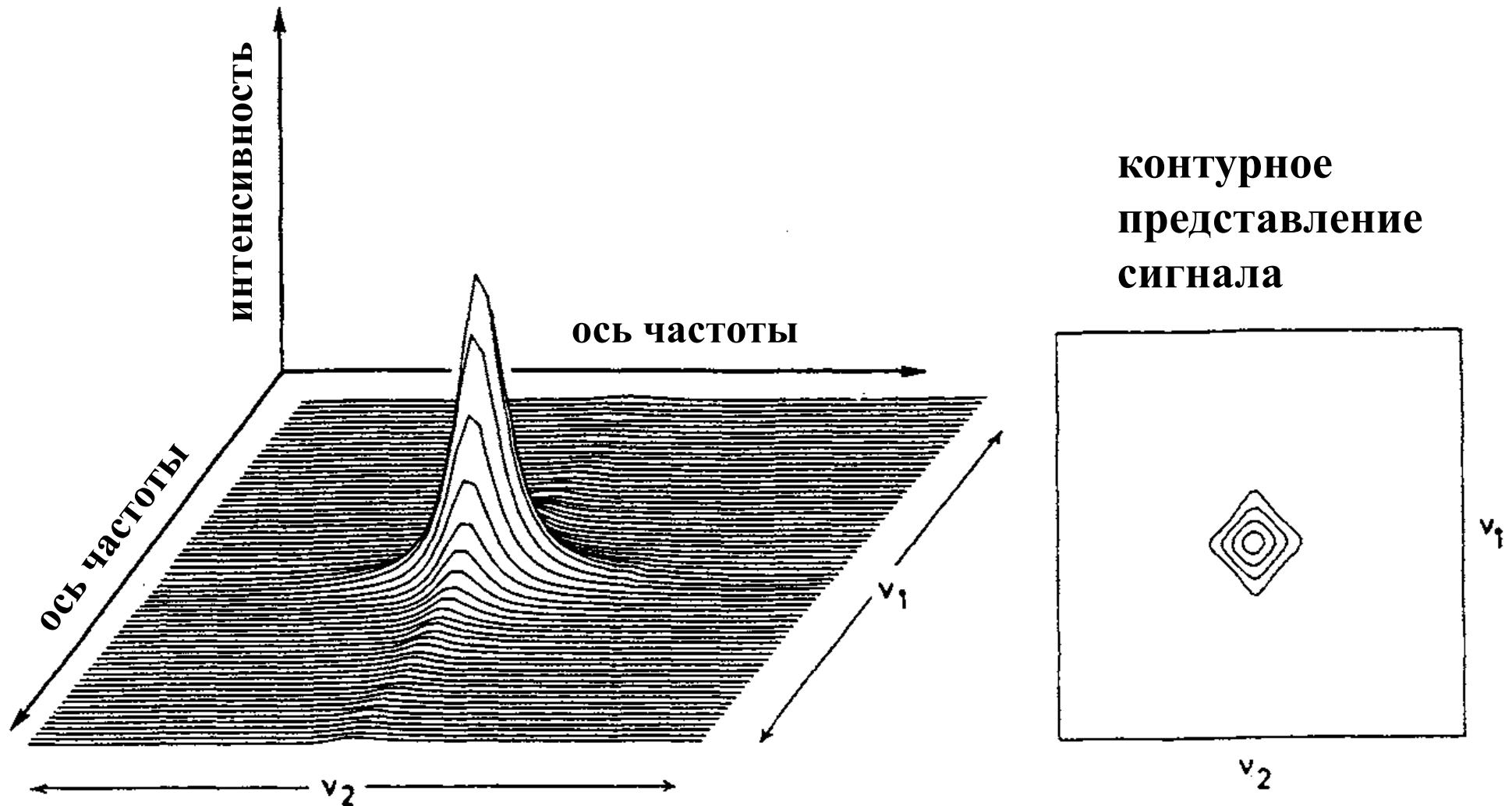


Методы двумерной спектроскопии ЯМР

Ядерный магнитный резонанс

**Двумерный спектр ЯМР – трёхмерная
зависимость интенсивности сигнала ЯМР
от хим. сдвигов или констант ССВ,
полученная в результате специальной
последовательности радиочастотных
импульсов, возбуждающих
ядерные переходы.**

Сигнал в двумерном ЯМР



Ядерный магнитный резонанс

Корреляционная спектроскопия (COrelatiон SрectroscopY - COSY):

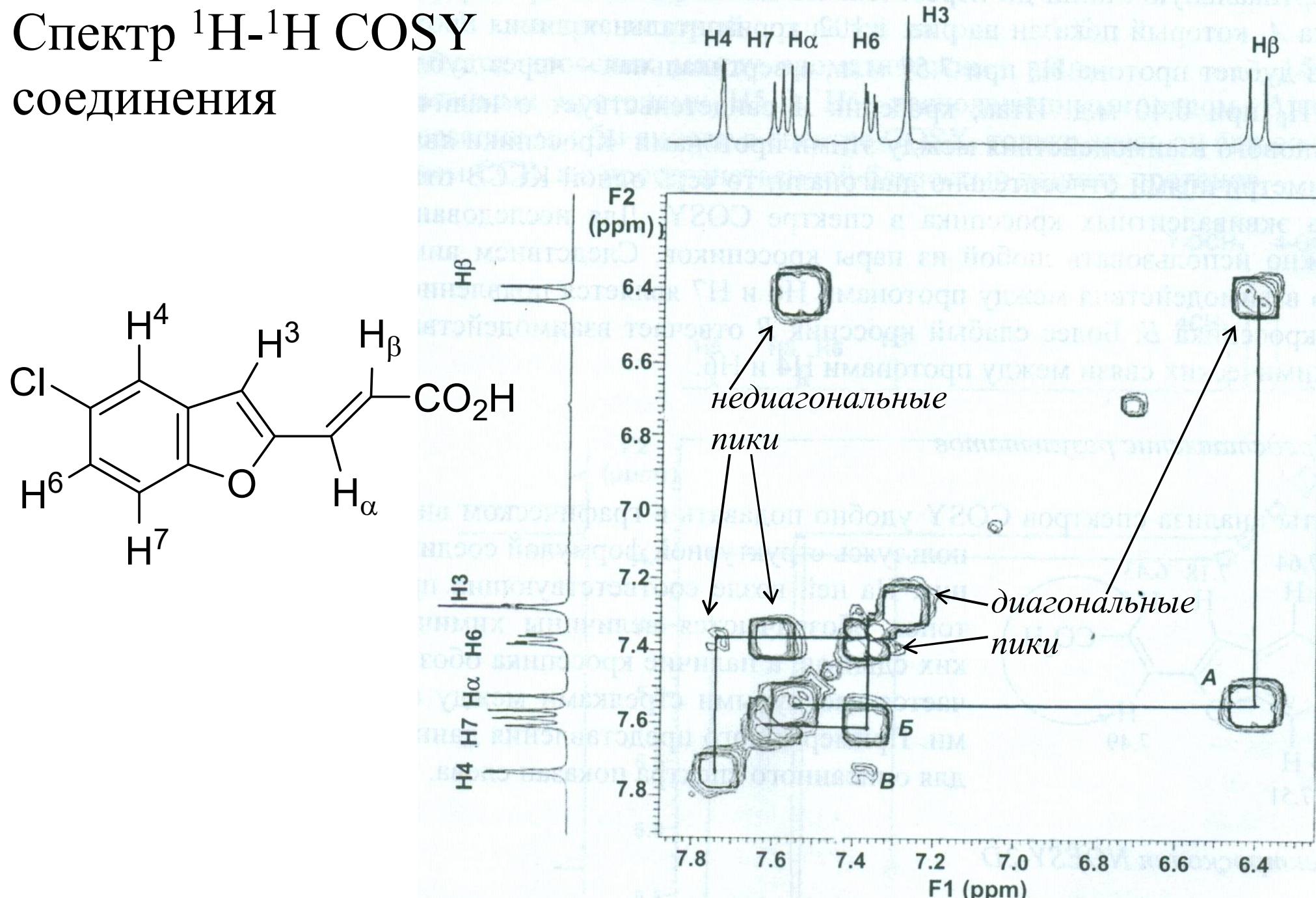
1. ^1H - ^1H COSY;

2. ^{13}C - ^1H COSY;

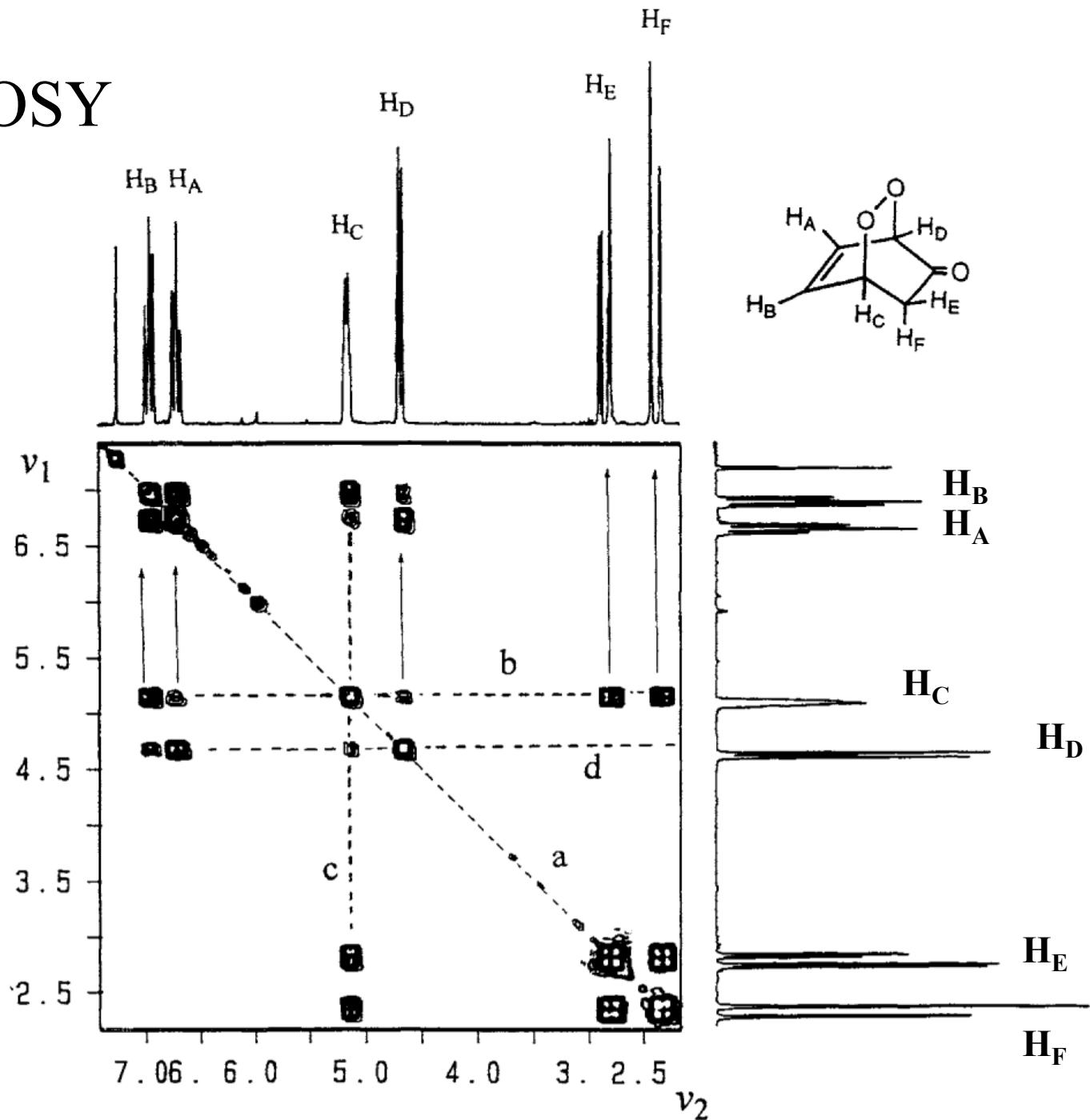
**3. Ядерный эффект Оверхаузера
(NOESY - Nuclear Overhauser Effect SpectroscopY).**

^1H - ^1H COSY – появление в спектре
недиагональных (кросс-пиков) для
протонов, связанных спин-спиновым
взаимодействием.

Спектр ^1H - ^1H COSY соединения



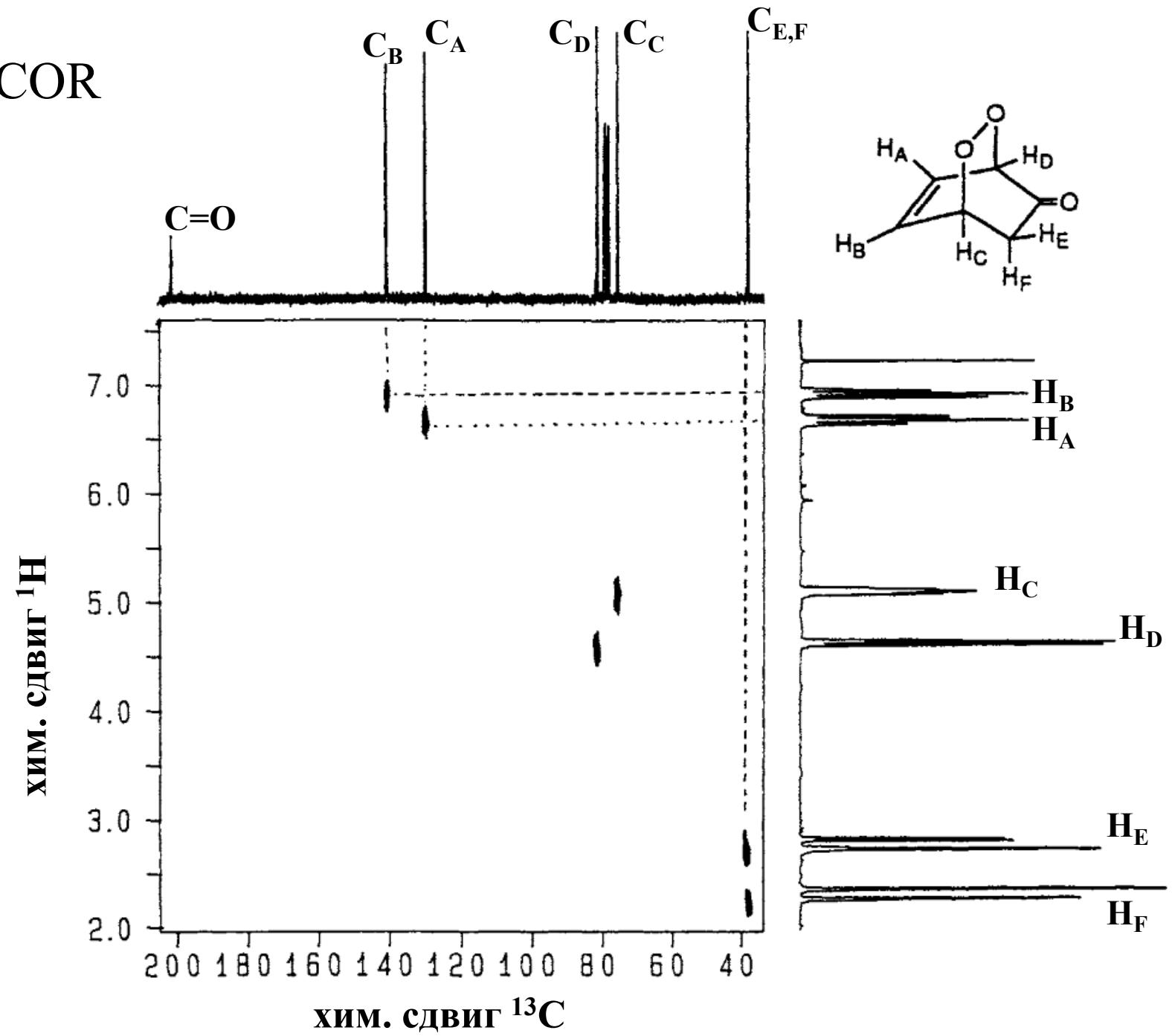
Спектр ^1H - ^1H COSY соединения



^{13}C - ^1H COSY – пики в спектре
соответствуют непосредственно
связанным ядрам ^{13}C и ^1H через одну
связь с константой CCB $^1J_{\text{C-H}}$.

НЕТСОР – НЕTeronuclear CORrelation –
гетероядерная корреляция

Спектр НЕТКОР соединения



Ядерный магнитный резонанс

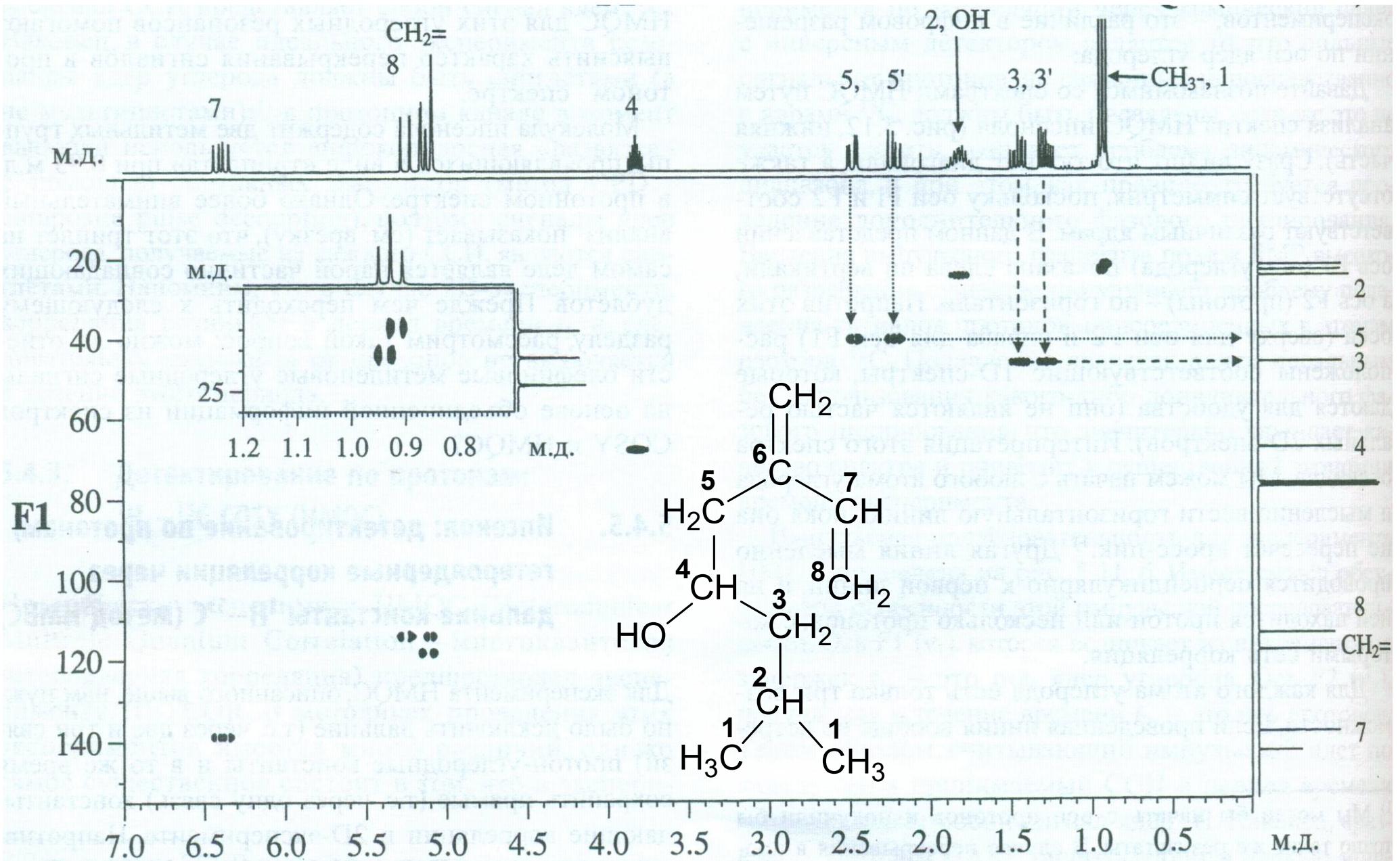
Регистрация сигналов в спектре, отвечающих непосредственно связанным ядрам ^{13}C и ^1H через одну связь.

HSQC – Heteronuclear Single Quantum Correlation
–гетероядерная одноквантовая корреляция

HMQC – Heteronuclear Multiple Quantum Correlation – гетероядерная многоквантовая корреляция

Ядерный магнитный резонанс

Спектр HMQC соединения

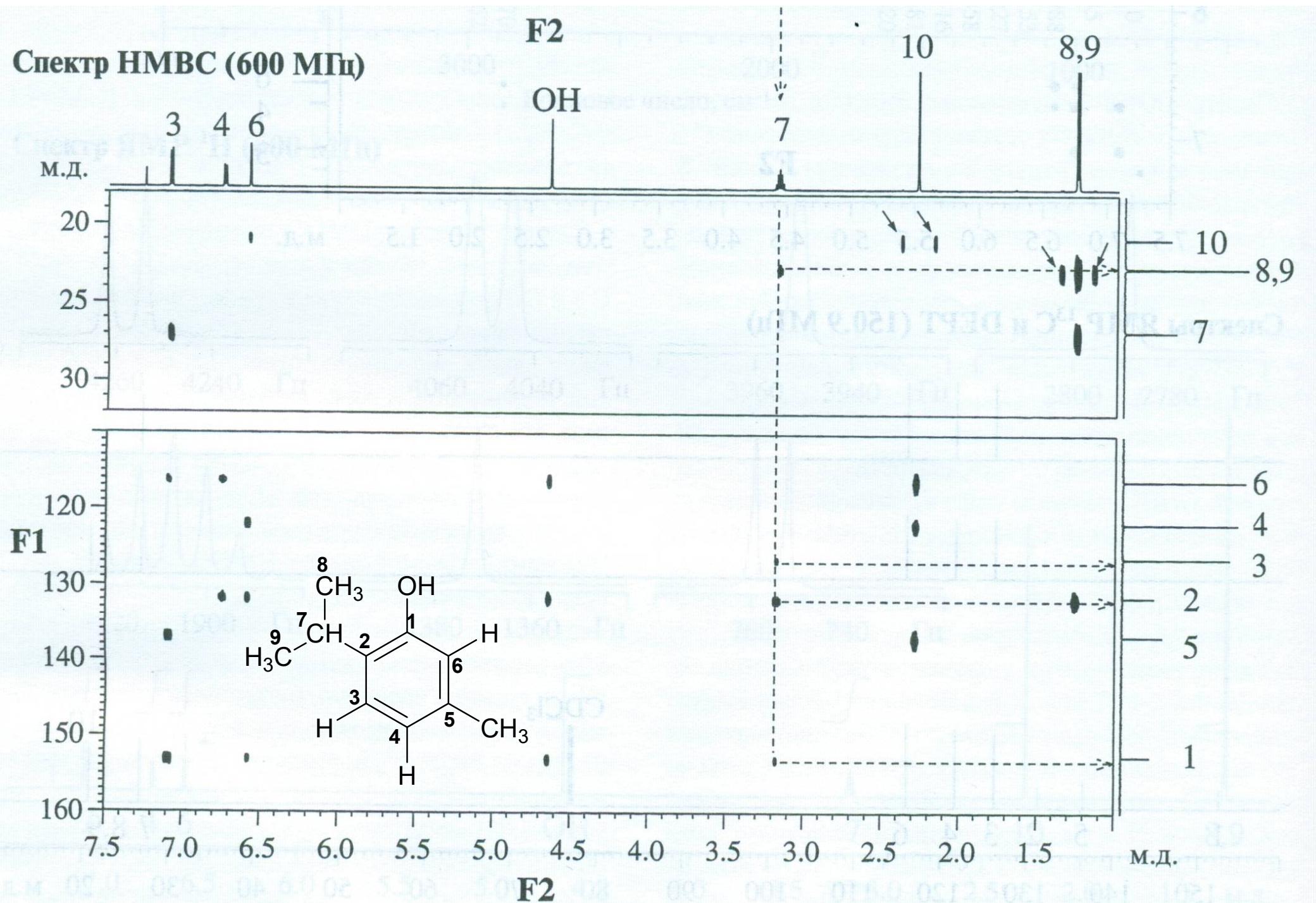


Ядерный магнитный резонанс

HMBC – Heteronuclear Multiple Bond Correlation

- гетероядерная многосвязевая корреляция
- пики в спектре соответствуют ядрам ^{13}C и ^1H связанным через 2 или 3 связи с константами $^2J_{\text{C-H}}$ и $^3J_{\text{C-H}}$.

Спектр HMBC соединения

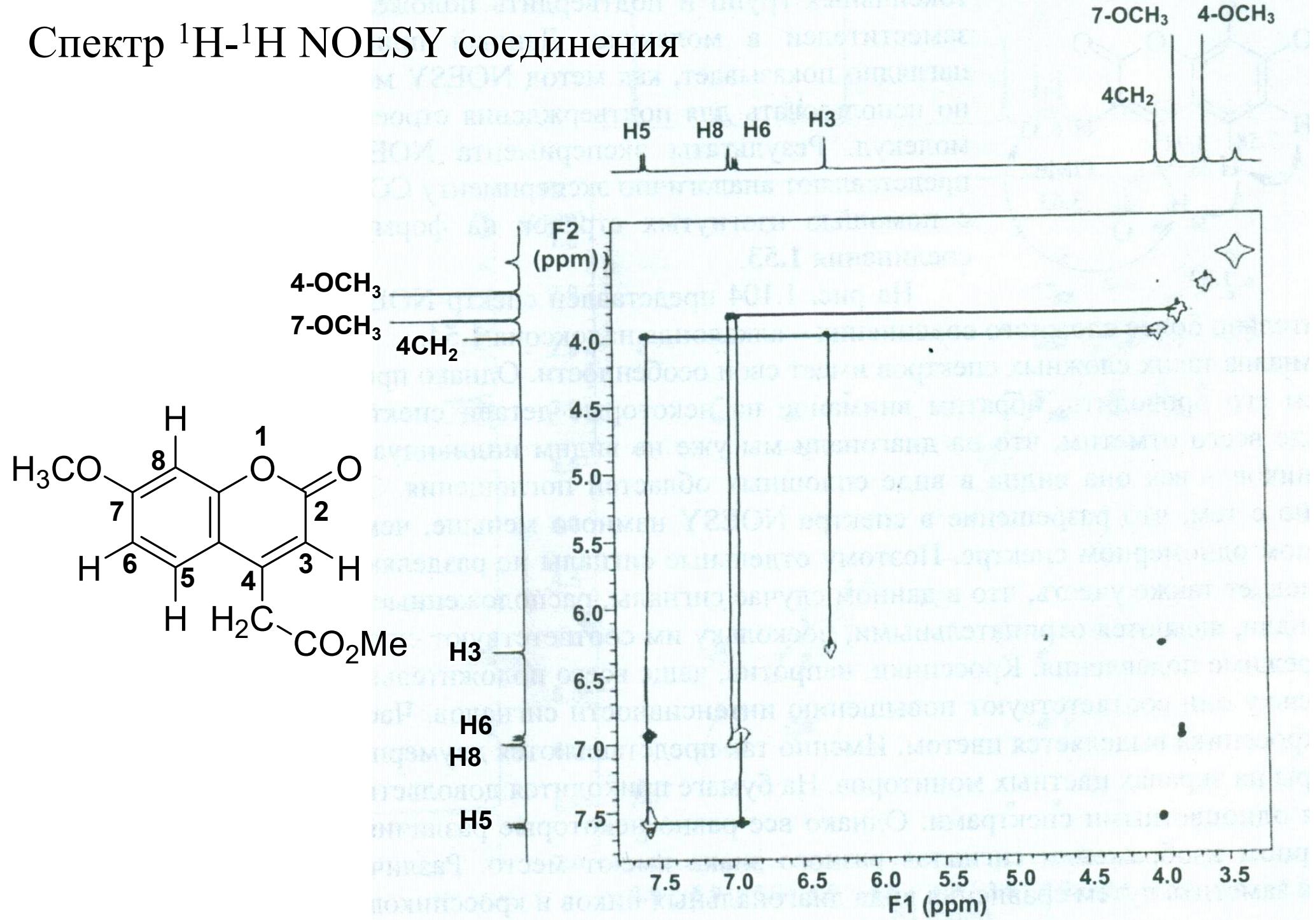


Ядерный эффект Оверхаузера

(NOESY - Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy)

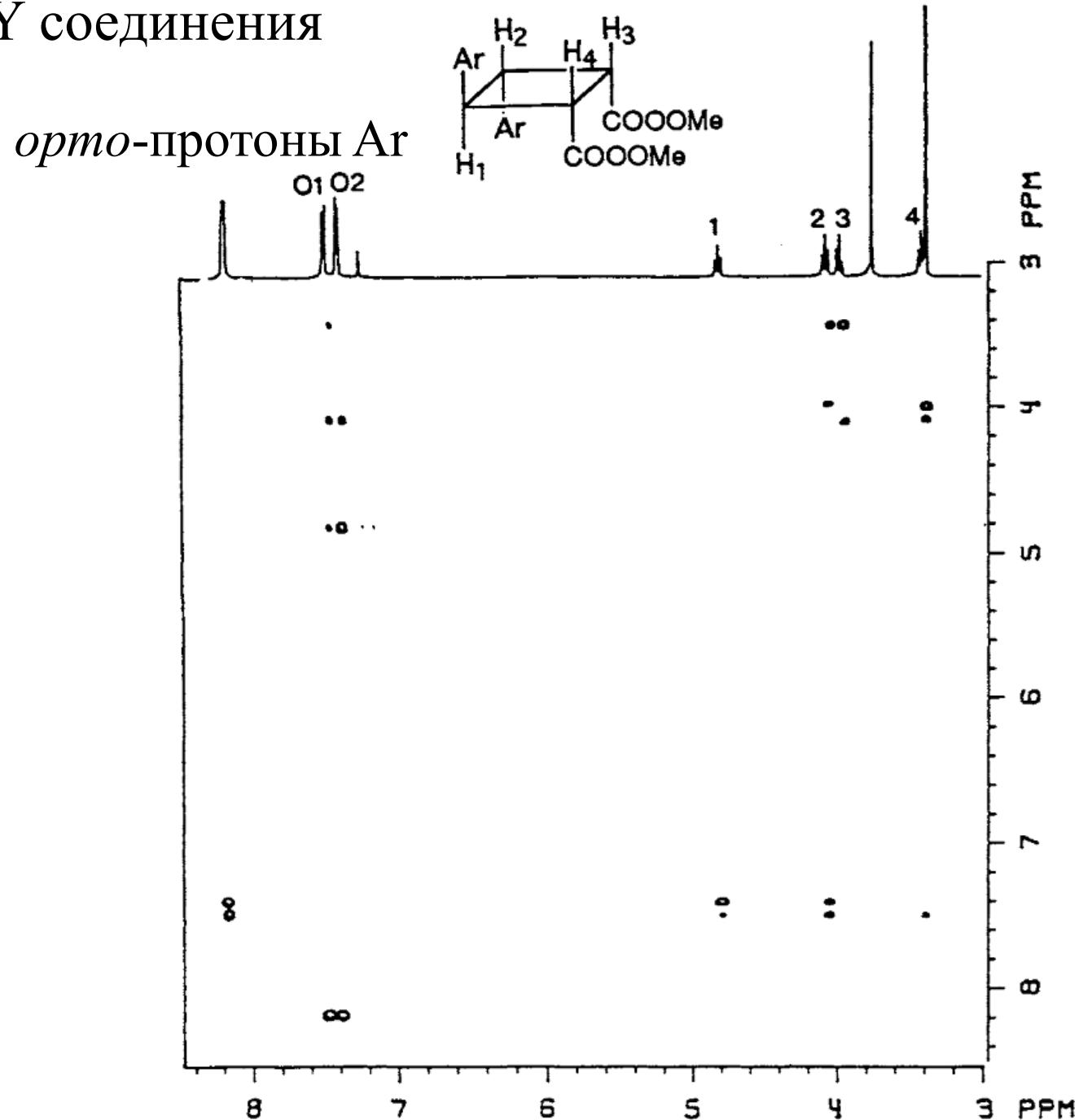
- позволяет определять пространственно сближенные протоны путем избирательного облучения сигналов.

Спектр ^1H - ^1H NOESY соединения

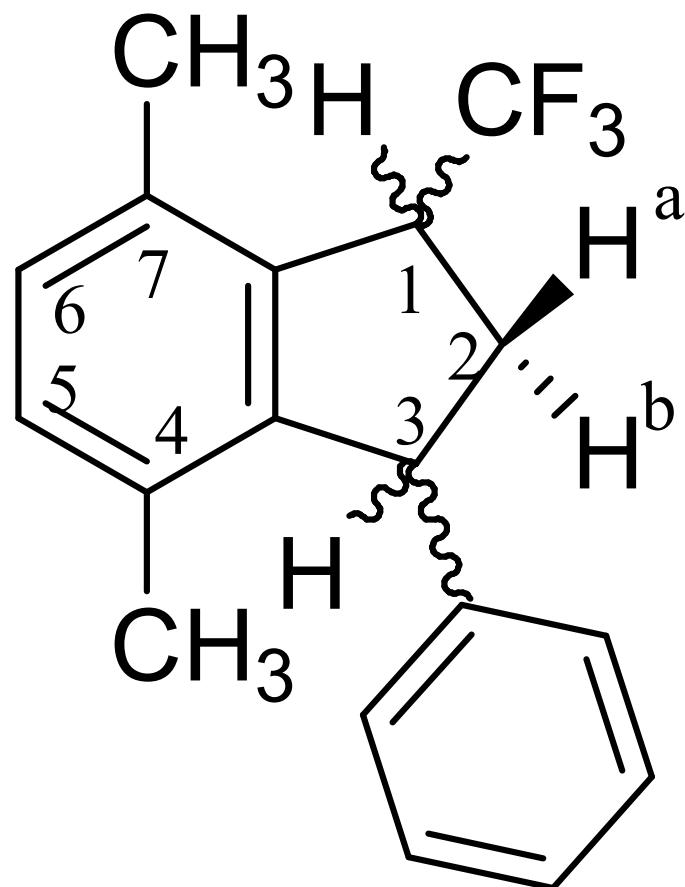


Ядерный магнитный резонанс

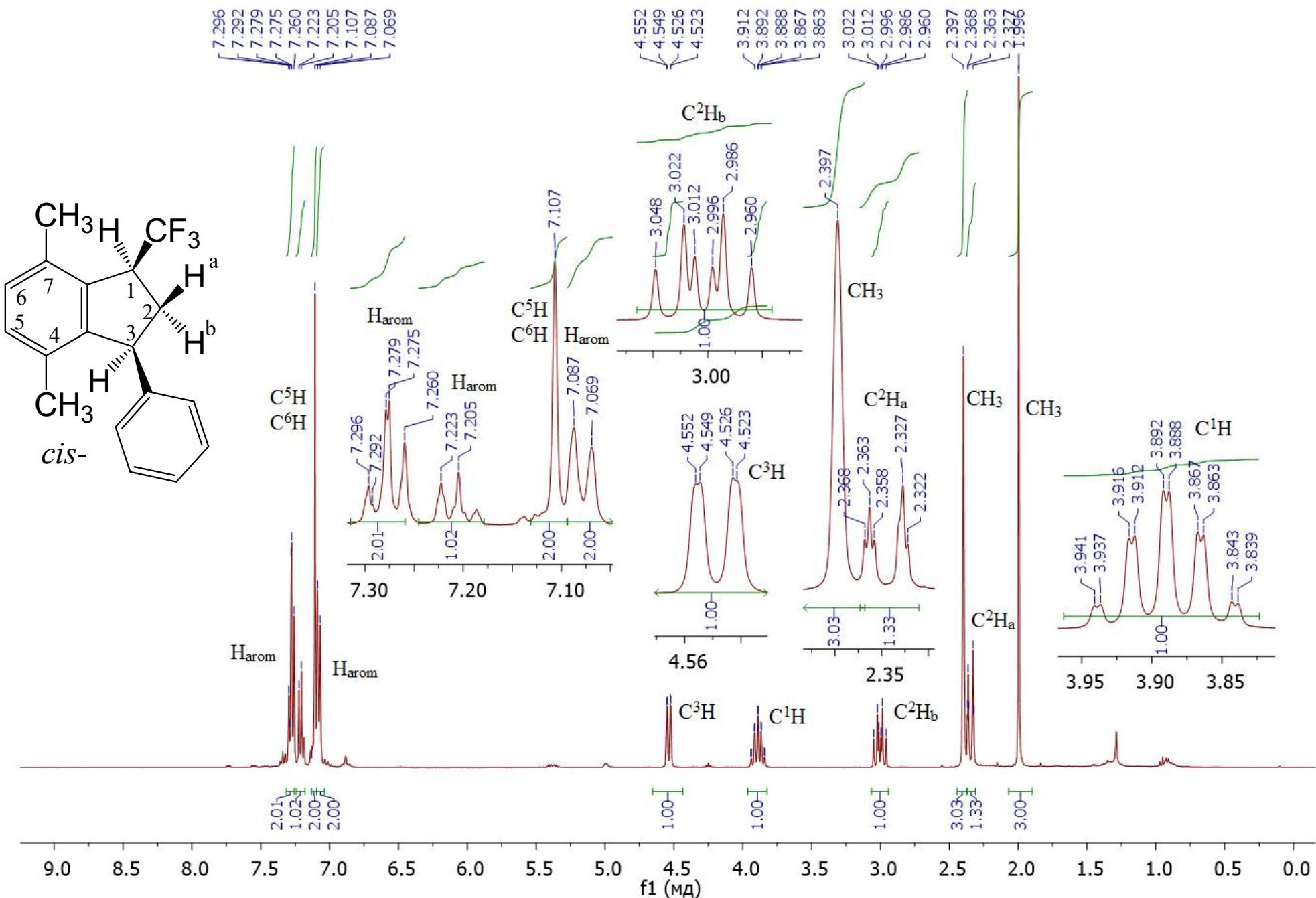
Спектр ^1H - ^1H NOESY соединения



Спектры соединения – проблема установления конфигурации заместителей в пятичленном цикле

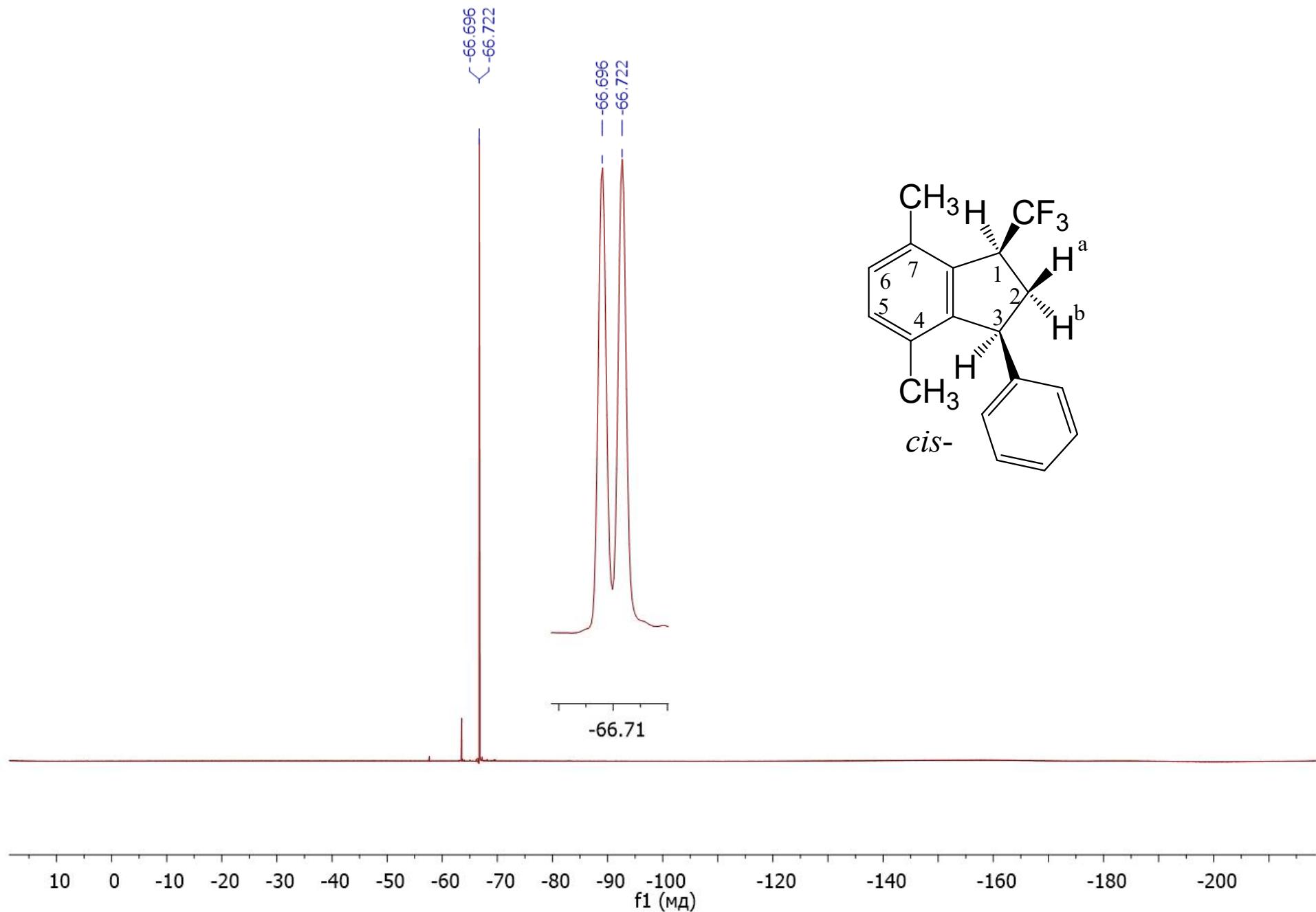


Спектр ЯМР ^1H соединения (CDCl_3 , 400 МГц)



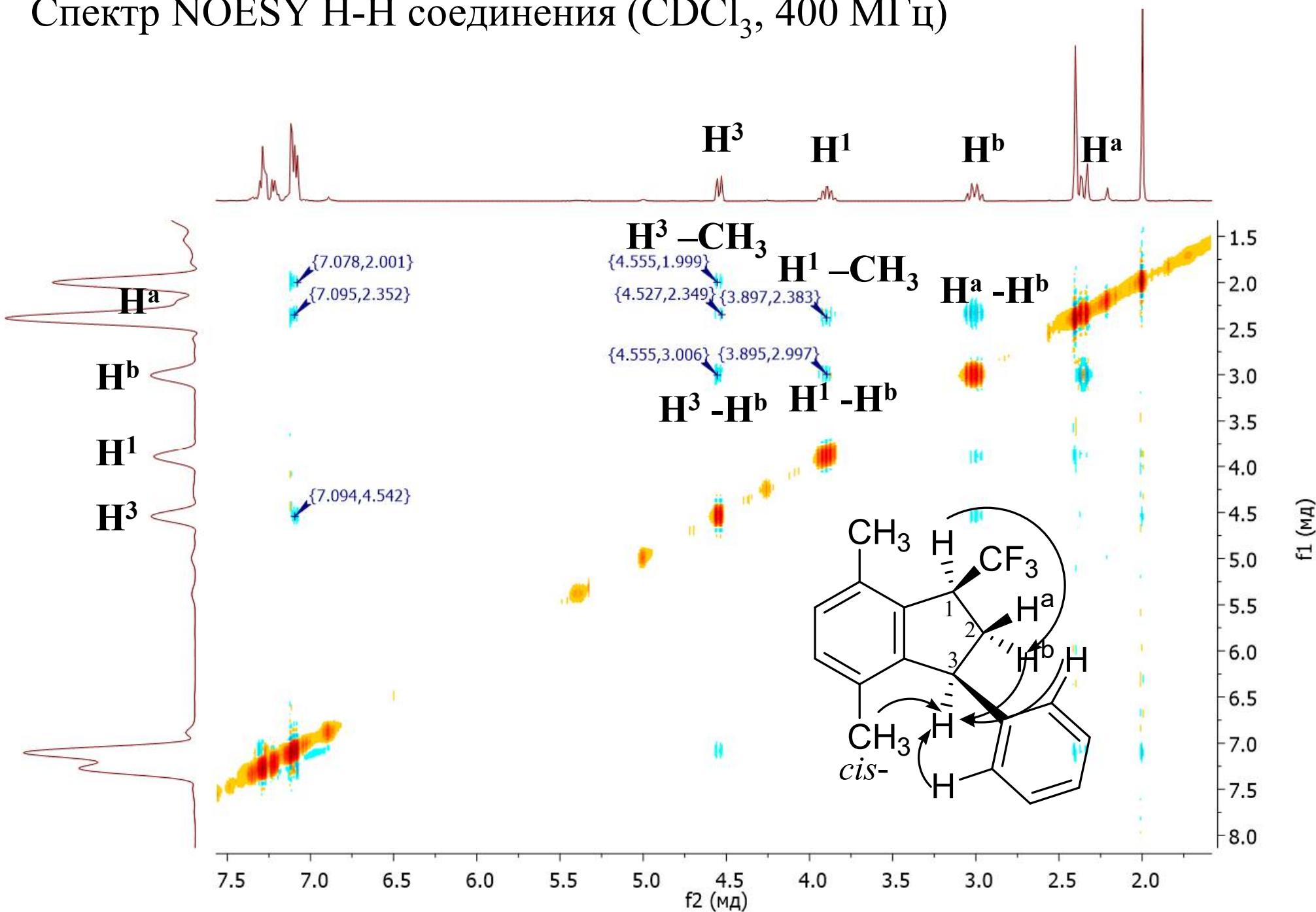
Ядерный магнитный резонанс

Спектр ЯМР ^{19}F соединения (CDCl_3 , 100 МГц)



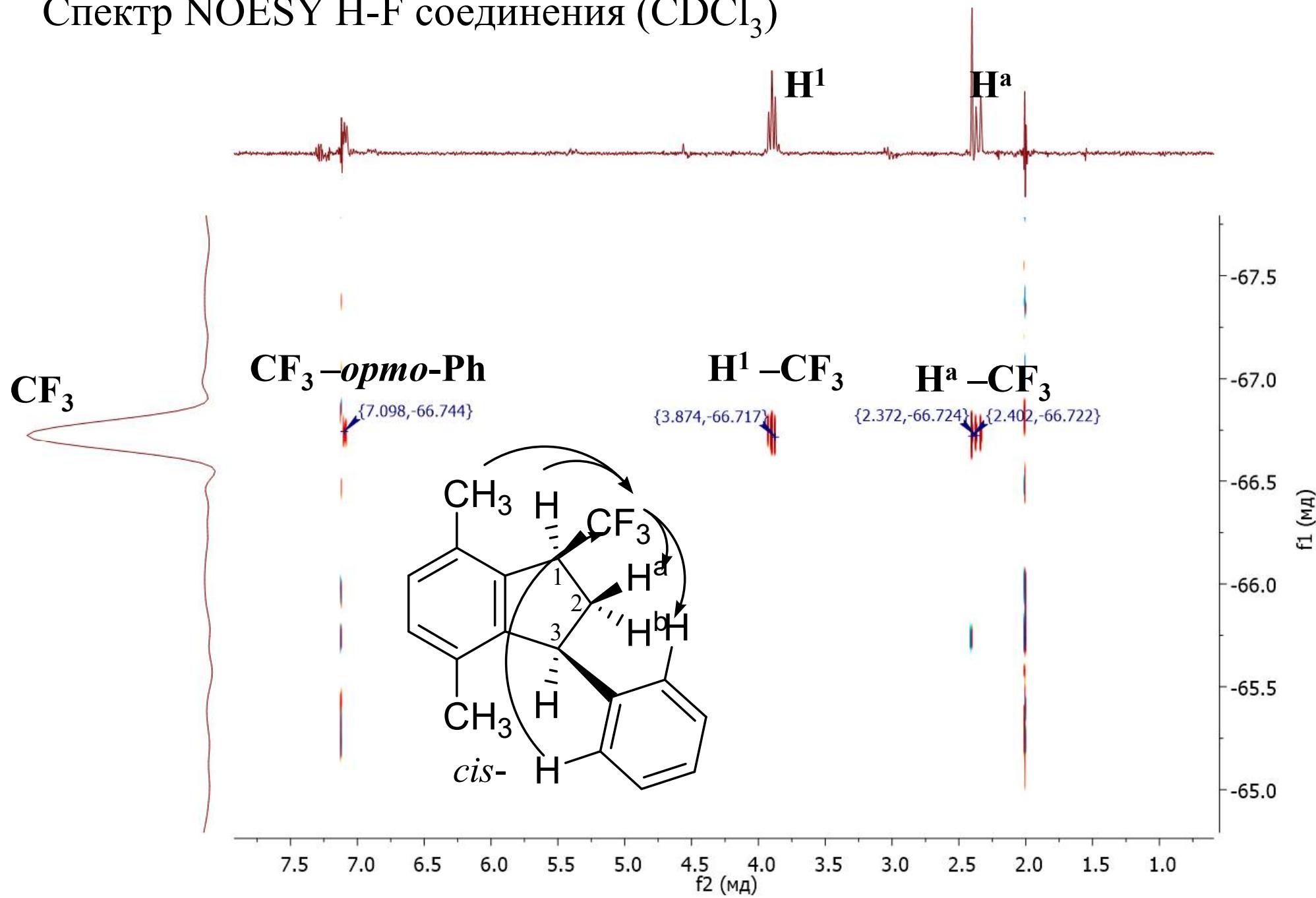
Ядерный магнитный резонанс

Спектр NOESY H-H соединения (CDCl_3 , 400 МГц)



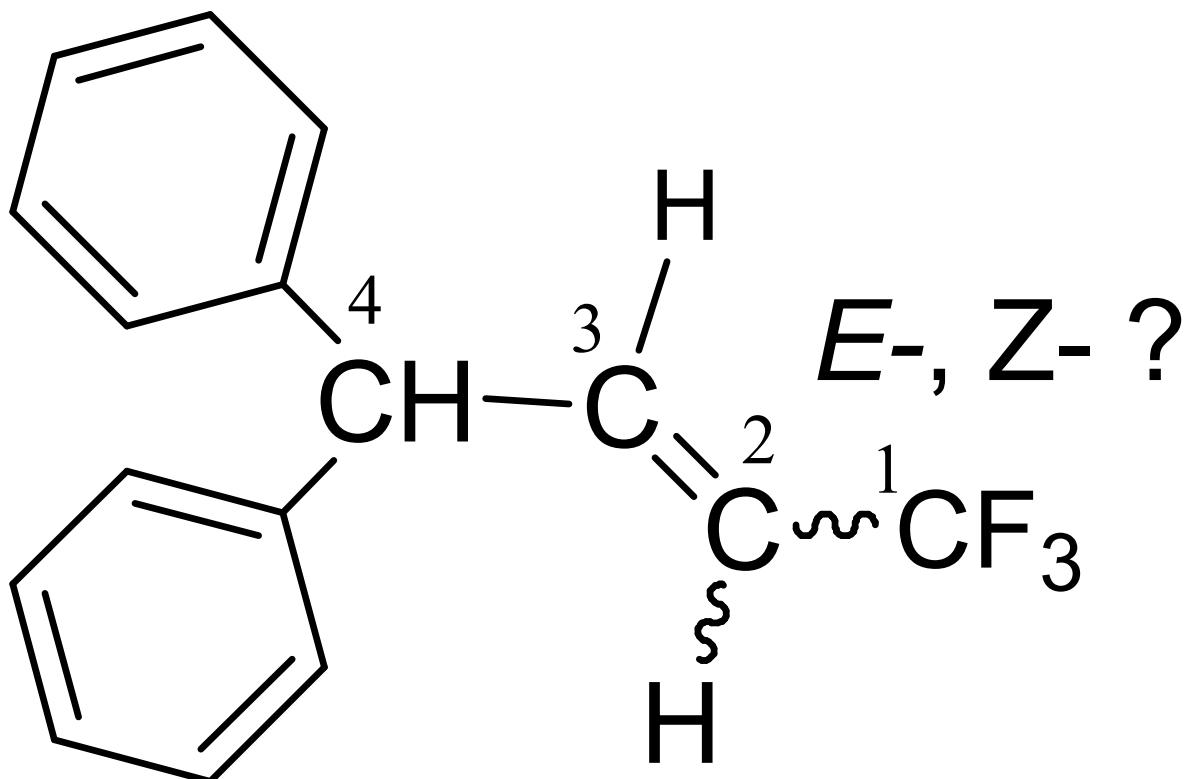
Ядерный магнитный резонанс

Спектр NOESY H-F соединения (CDCl_3)

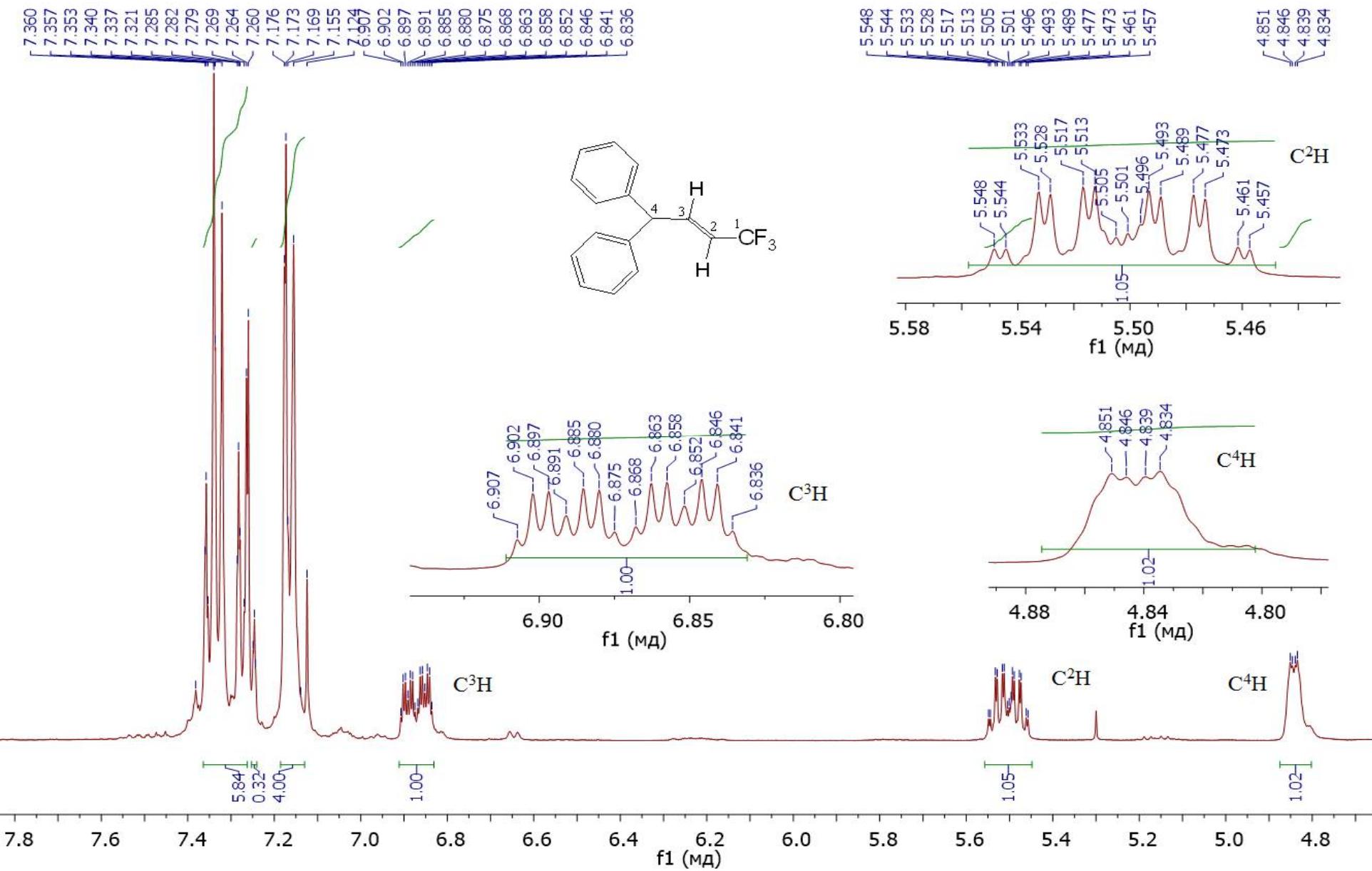


Ядерный магнитный резонанс

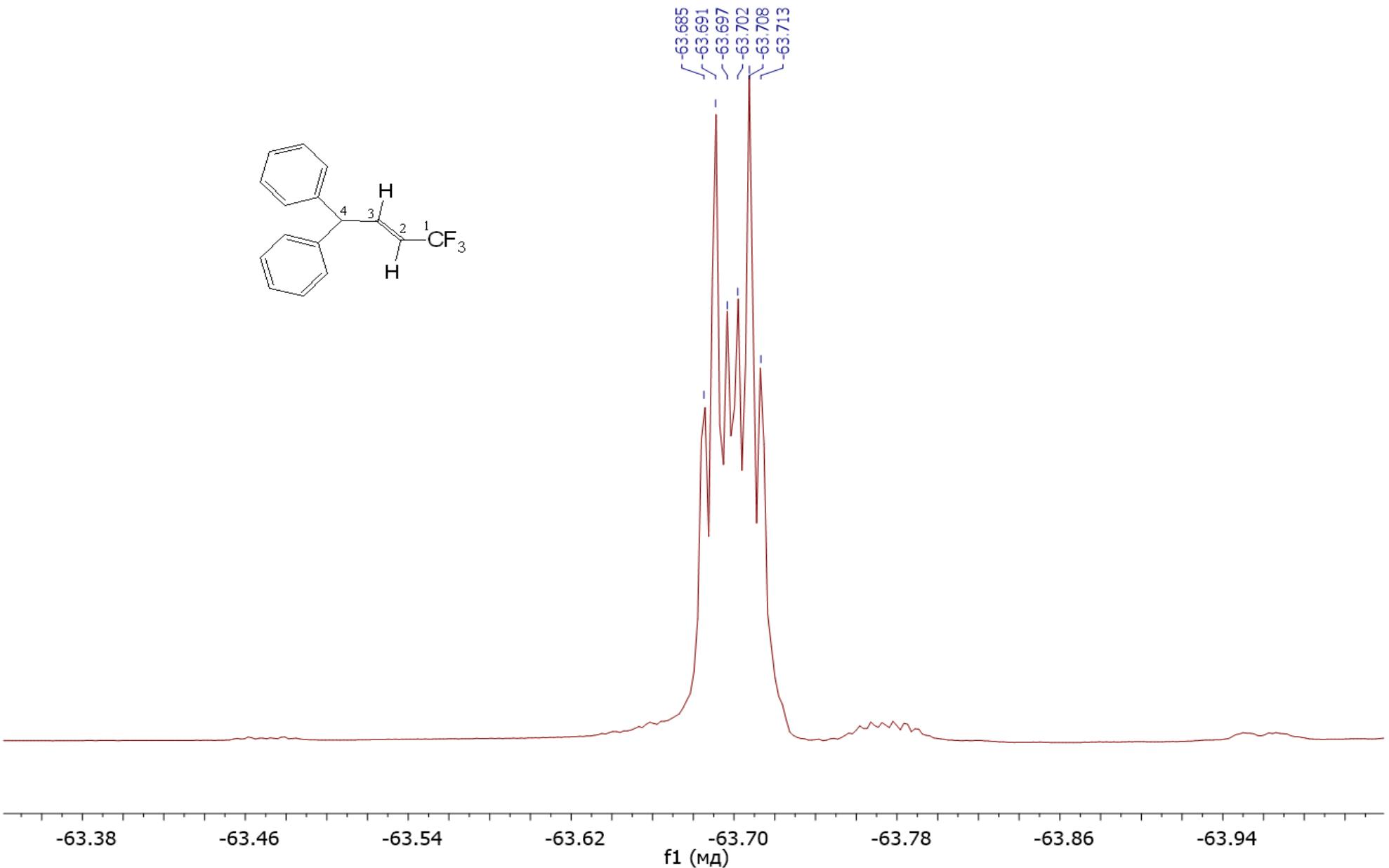
Спектры соединения – проблема установления конфигурации заместителей при связи C=C



Спектр ЯМР ^1H соединения (CDCl_3 , 400 МГц)

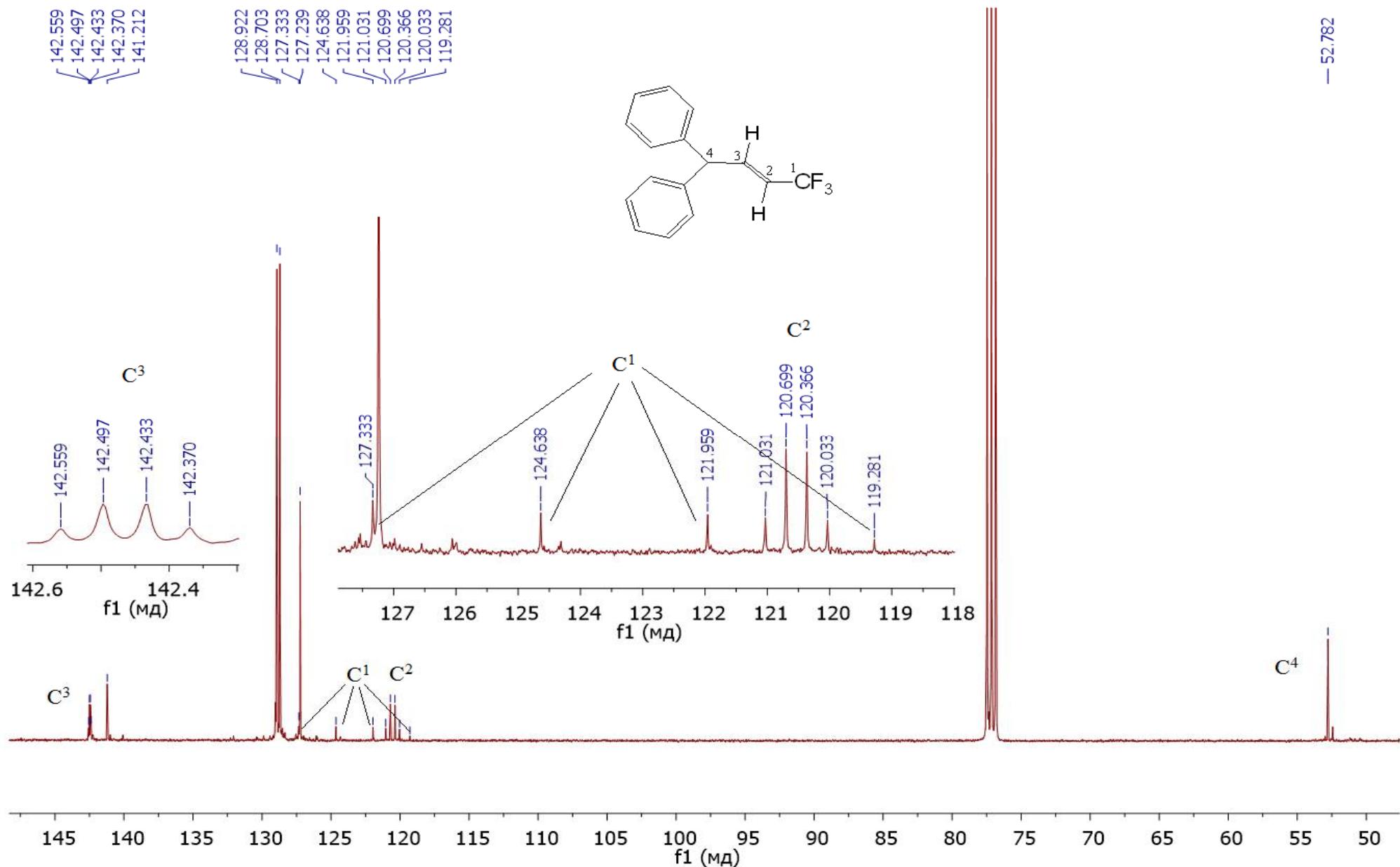


Спектр ЯМР ^{19}F соединения (CDCl_3 , 100 МГц)



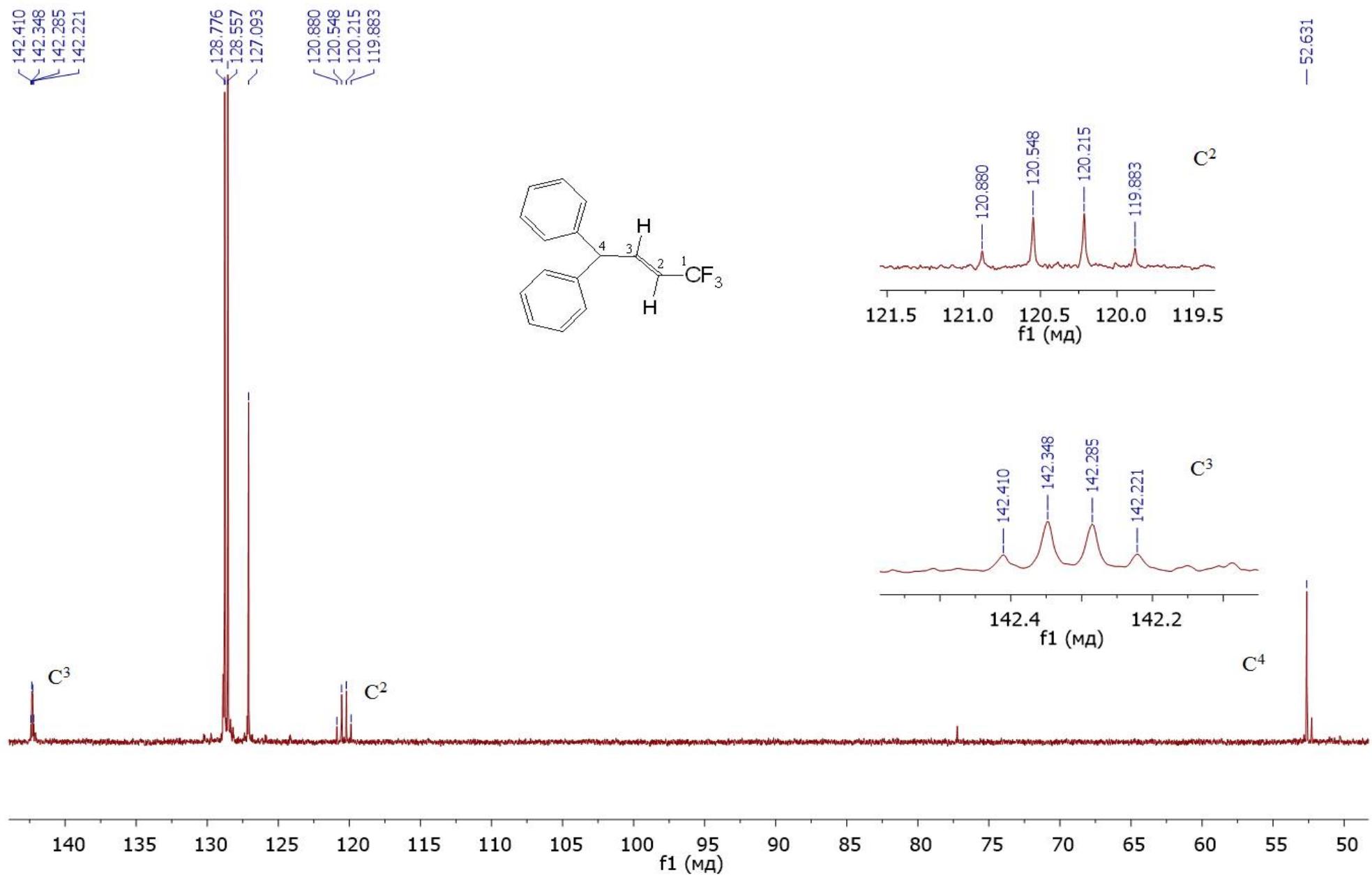
Ядерный магнитный резонанс

Спектр ЯМР ^{13}C соединения (CDCl_3 , 100 МГц)



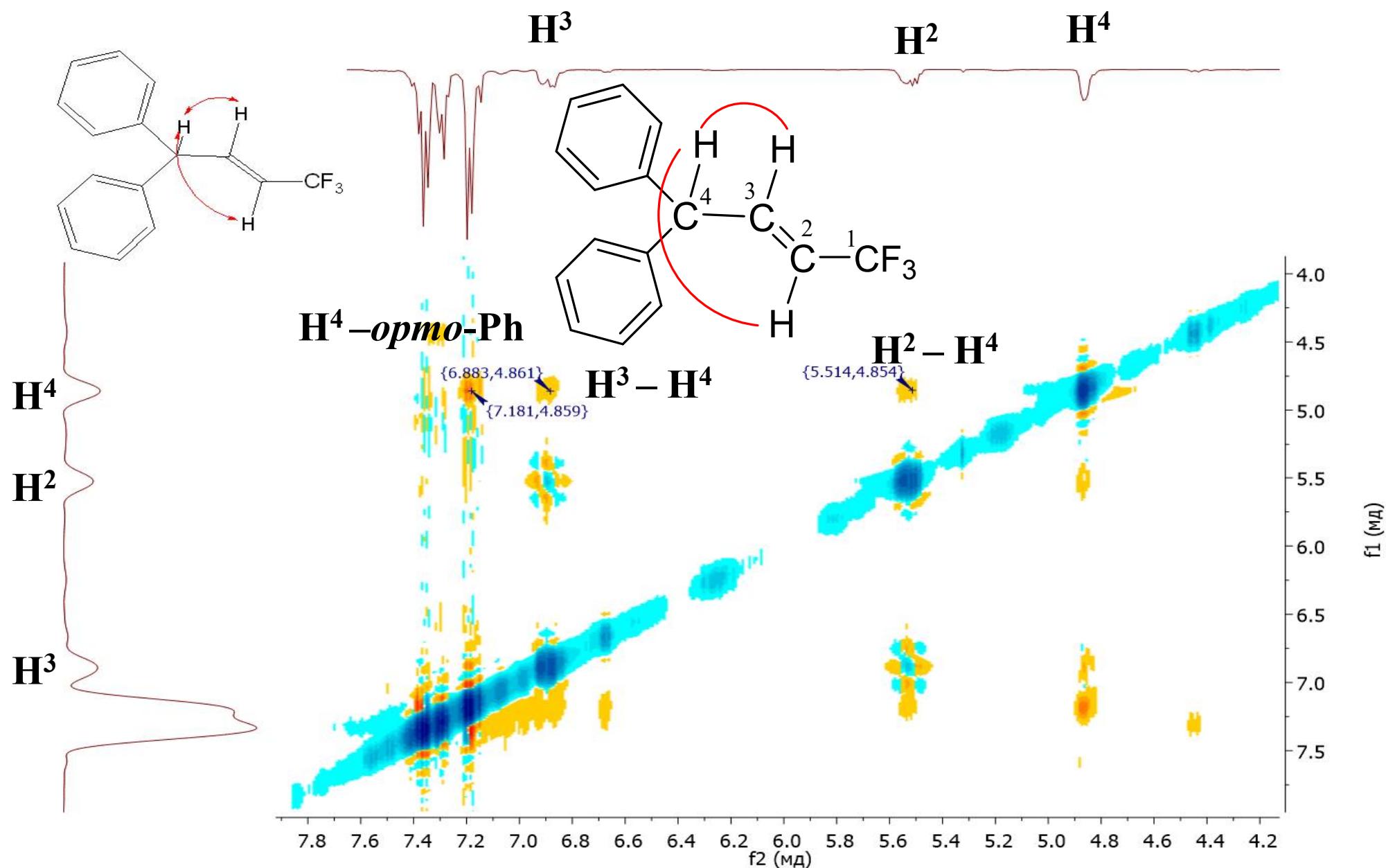
Ядерный магнитный резонанс

Спектр DEPT соединения (CDCl_3 , 100 МГц)



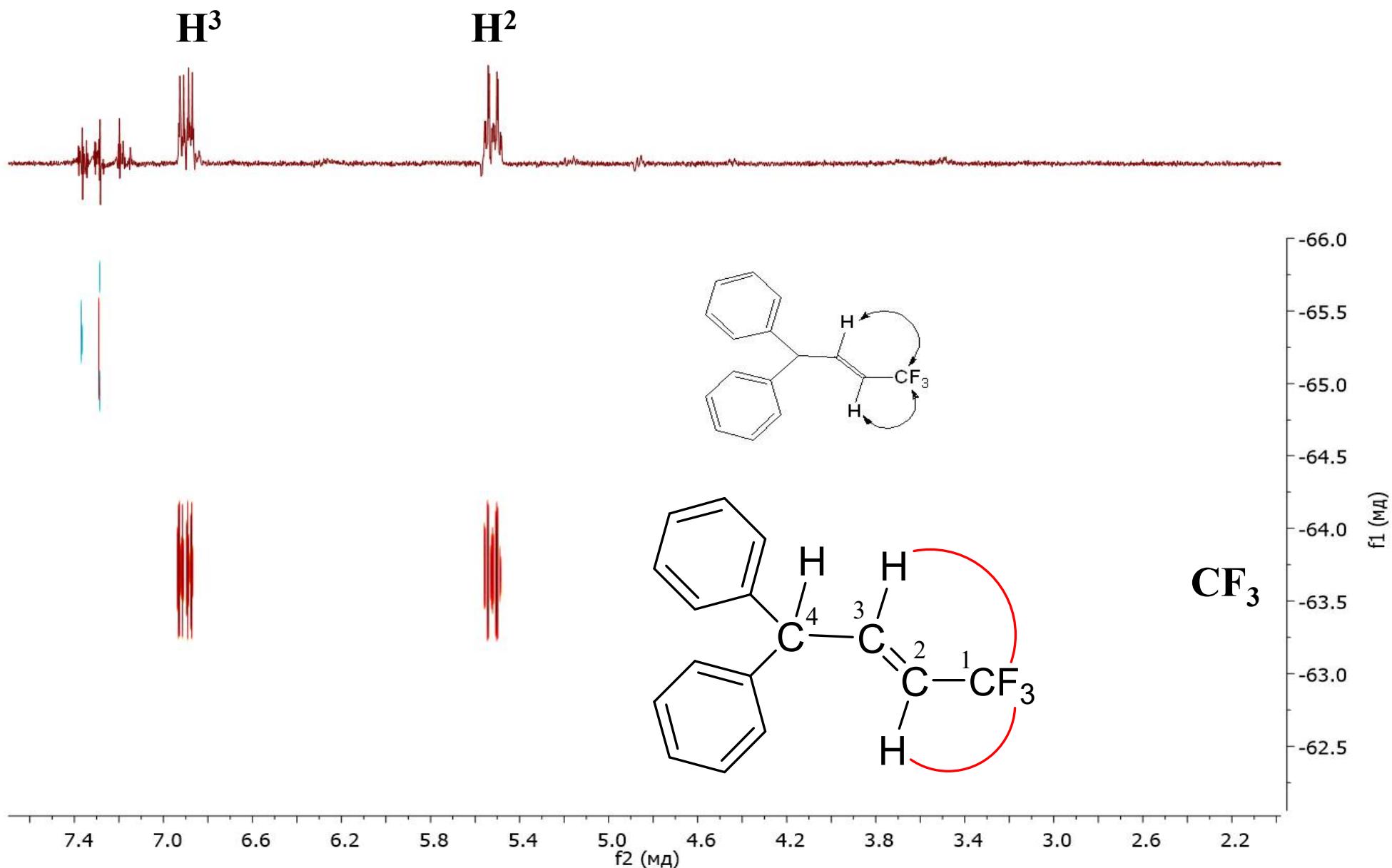
Ядерный магнитный резонанс

Спектр NOESY H-H соединения (CDCl_3 , 400 МГц)



Ядерный магнитный резонанс

Спектр NOESY H-F соединения (CDCl_3)



Ядерный магнитный резонанс

Рекомендуемая литература

1. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К.
Определение строения органических соединений.
М: Мир, 2006.
2. Ершов Б.А. Спектроскопия ЯМР в органической химии. СПб., 1995.
3. Дероум А. Современные методы ЯМР в химических исследованиях. М: Мир, 1990.
4. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М: Мир, 1984.
5. Сергеев Н.М. Спектроскопия ЯМР. М., 1982.