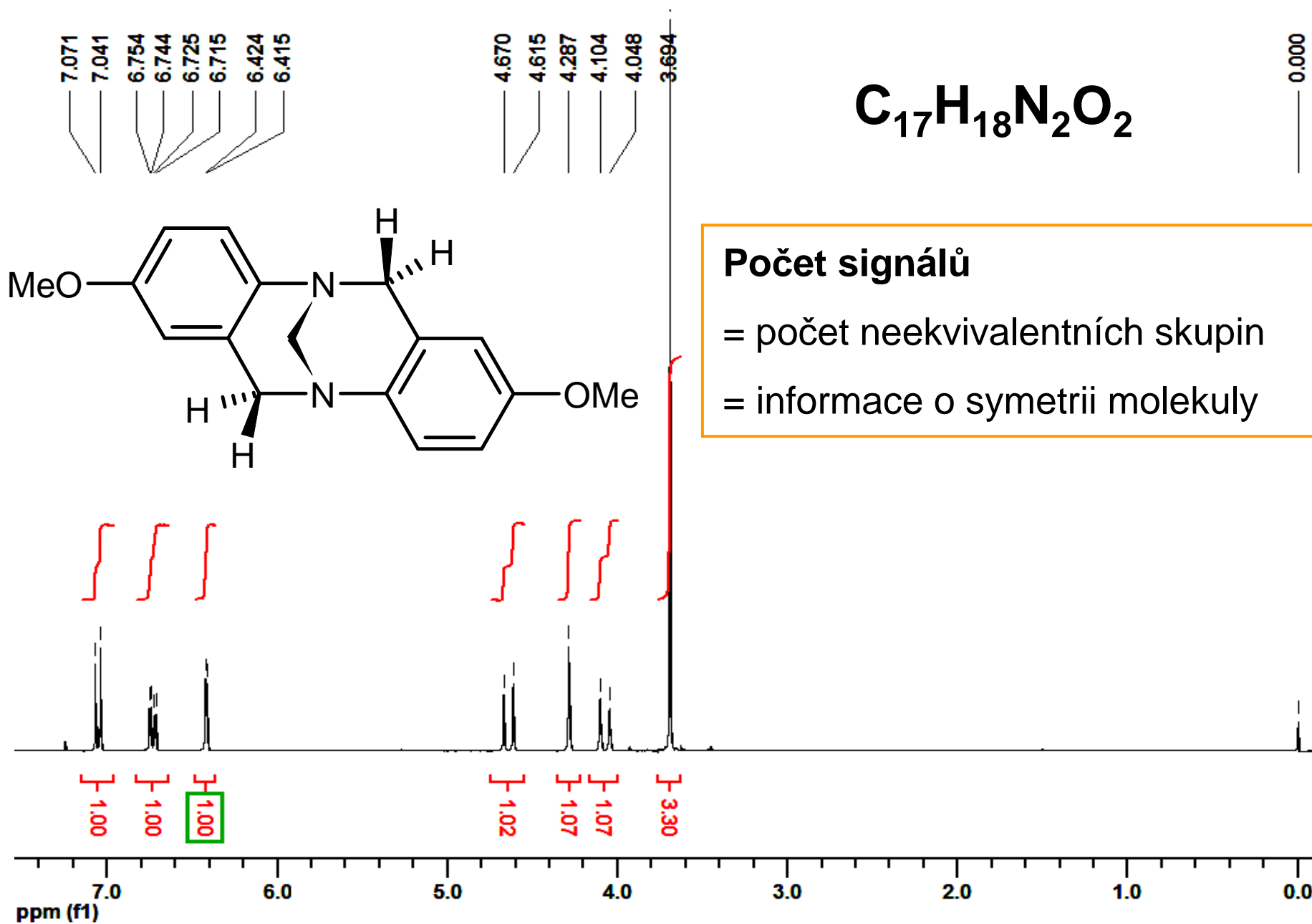


Spektra ^1H NMR

Velmi „zjednodušeně“ !

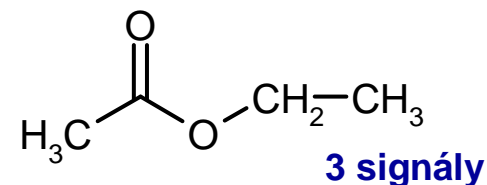
Bohumil Dolenský

Spektra ^1H NMR ... Počet signálů

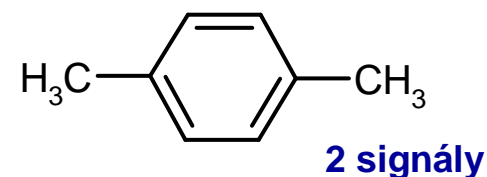


Spektrum ^1H NMR ... Počet signálů

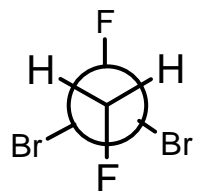
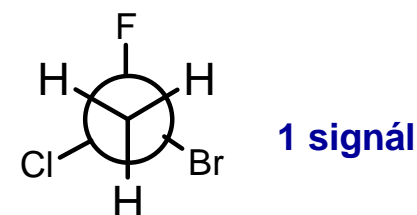
Počet signálů v NMR spektru čisté látky odpovídá počtu chemicky neekvivalentních jader.



Homotropní. Chemicky ekvivalentní jádra jsou taková, která jsou v důsledku symetrie nerozlišitelná. Počet signálů odráží symetrii látky.

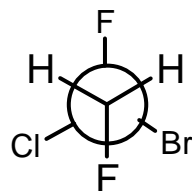


Za chemicky ekvivalentní lze považovat i jádra, která jsou ekvivalentní v důsledku rychlé rotace skupiny nebo jiné chemické výměny. Vodíky methyly jsou vždy ekvivalentní.



Enantiotopní jádra jsou nerozlišitelné (chirální posunová činidla)

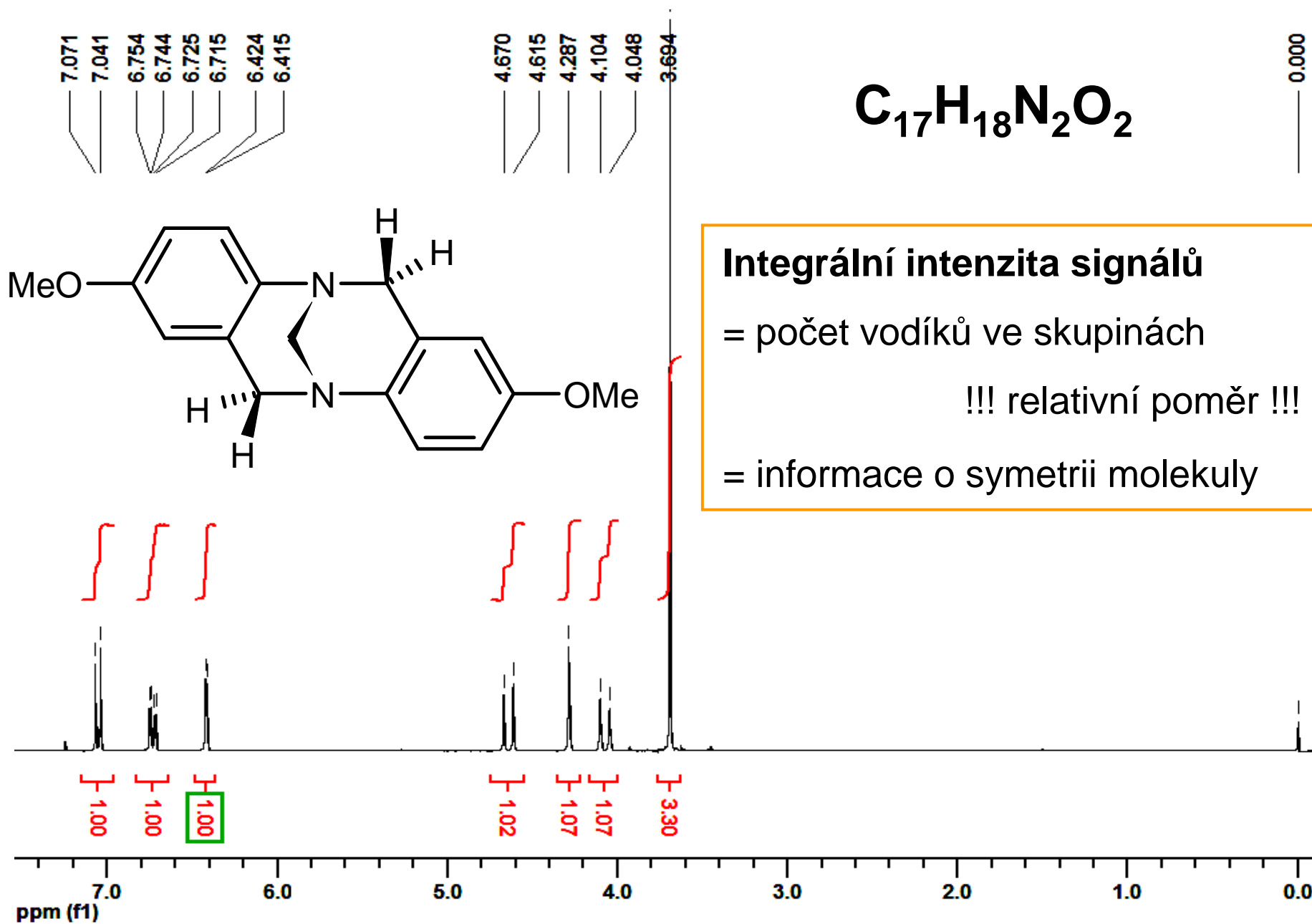
1 signál



Diastereotopní jádra jsou rozlišitelná.

2 signály

Spektra ^1H NMR ... Integrální intenzita signálů



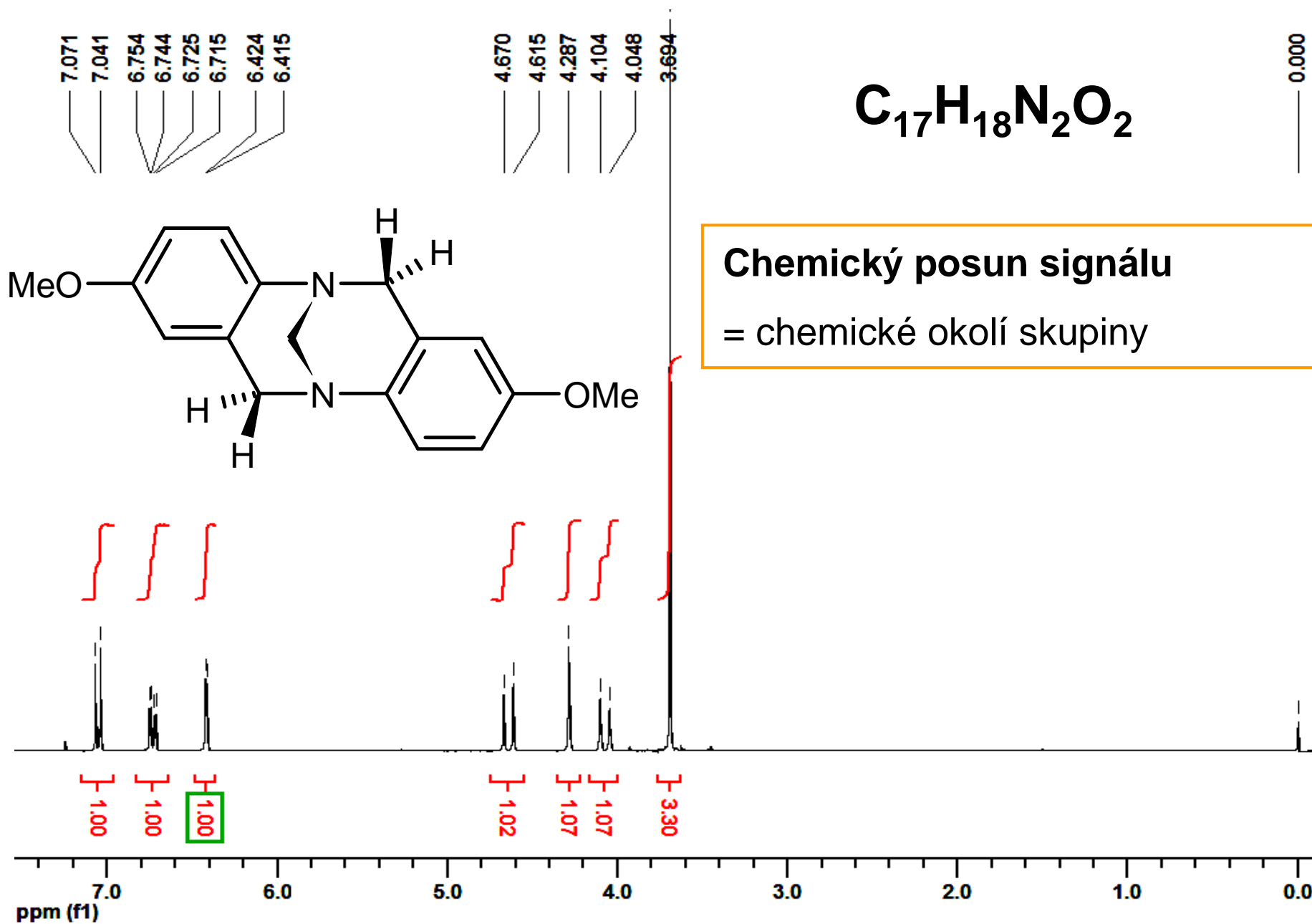
Spektra ^1H NMR ... Integrální intenzita signálů

Intenzita signálu je přímo úměrná počtu chemicky ekvivalentních atomů, které reprezentuje; intenzita signálů je úměrná molárnímu zastoupení atomů.

(Toto neplatí například v případě, že doba akvizice je výrazně kratší než relaxační čas atomů či dochází k NOE efektu. Typickým případem je ^{13}C NMR měřené standardním způsobem.)

Je-li měřena směs látek A a B, pak poměr intenzit signálů I_A / I_B je roven molárnímu poměru látek násobenému poměrem počtu atomů reprezentovaným daným signálem $p_A \cdot n_A / p_B \cdot n_B$, čehož lze využít ke stanovení molární hmotnosti či čistoty.

Spektra ^1H NMR ... Chemický posun signálu



Spektra ^1H NMR ... Chemický posun signálu

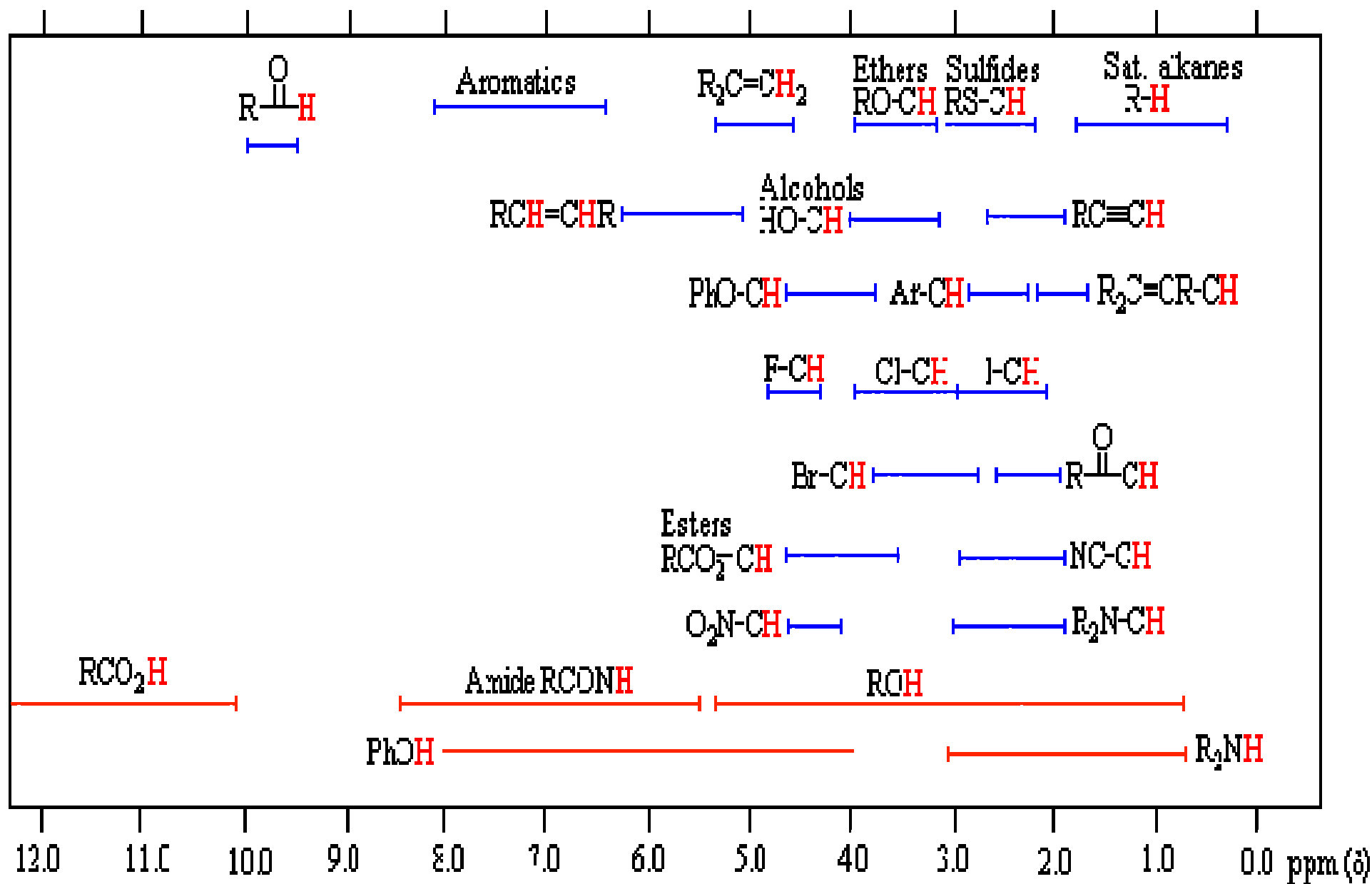
Hodnota chemického posunu odráží chemické okolí atomů reprezentované signálem.

(Není omezeno na danou molekulu. Chemický posun ovlivňuje i rozpouštědlo či nečistoty.)

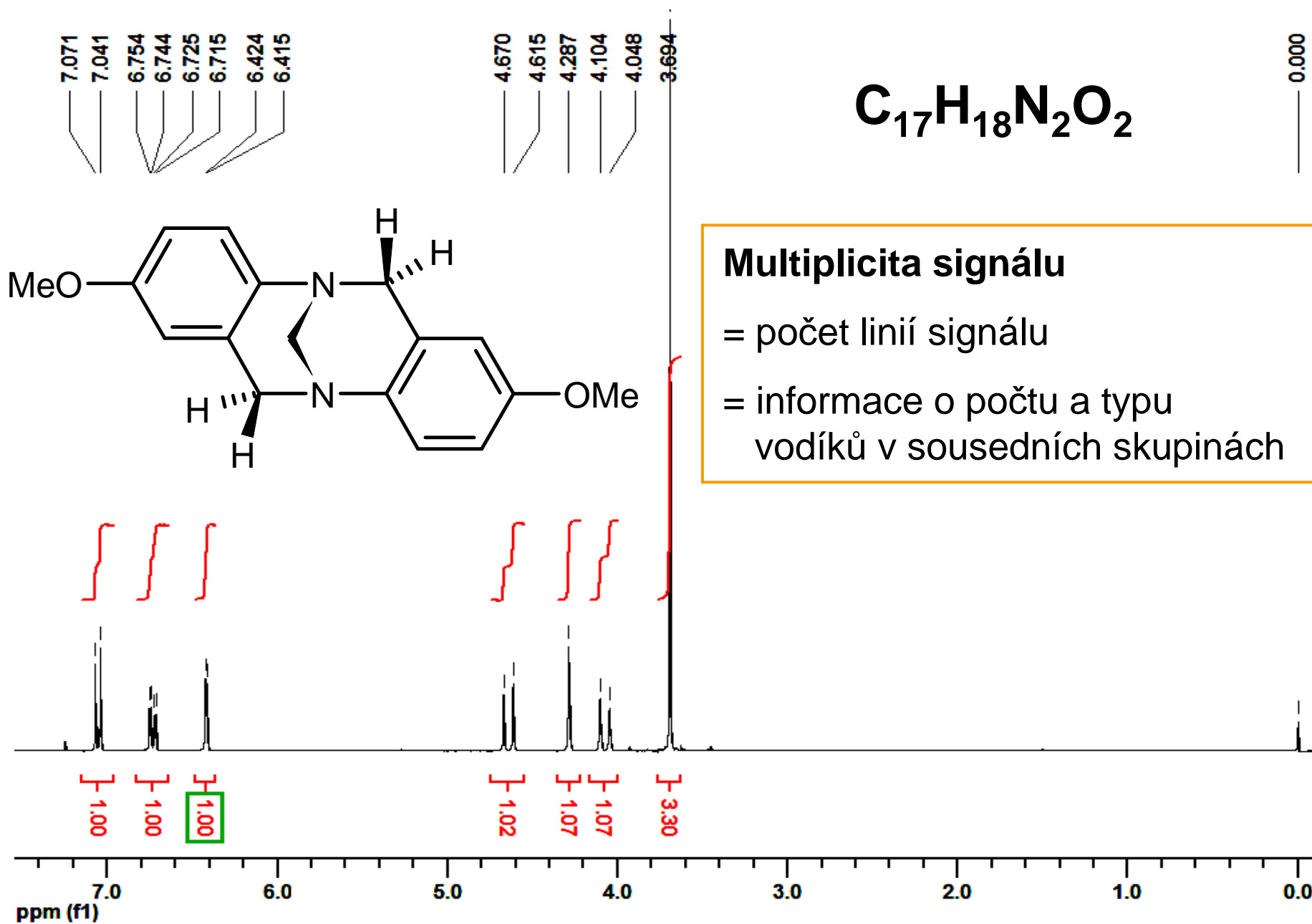
Z rozsáhlých tabulek těchto hodnot lze usuzovat na možné strukturní fragmenty neznámé látky.

Pomocí „inkrementových“ příspěvků lze predikovat NMR spektra známých látek.

Spektra ^1H NMR ... Chemický posun signálu



Spektra ^1H NMR ... Multiplicita signálu



Spektra ^1H NMR ... Multiplicita signálu

Multiplicita signálu

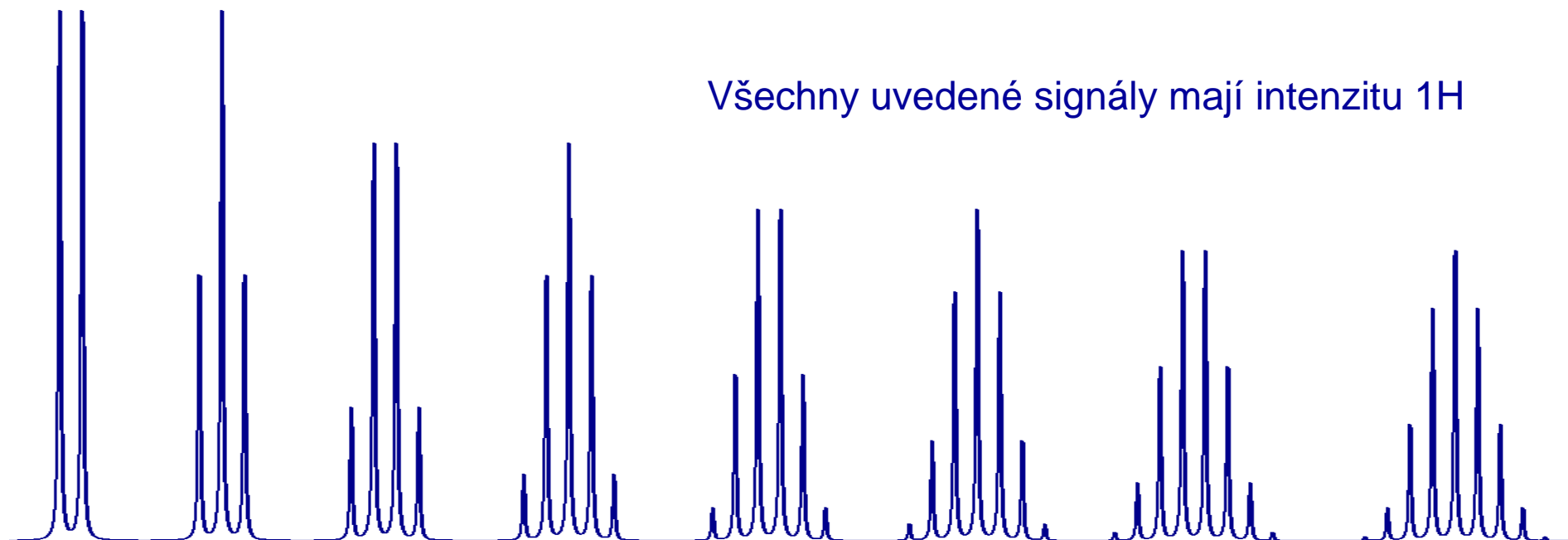
= počet linií signálu. Je důsledkem interakce se sousedními vodíky vzdálenými přes tři vazby (někdy též přes 2 či 4 vazby).

$$= 2 \cdot I_{\text{H}} \cdot n + 1 \quad \rightarrow\rightarrow\rightarrow \quad I_{\text{H}} = \frac{1}{2} \quad \rightarrow\rightarrow\rightarrow \quad \boxed{n+1} \quad n = \text{počet sousedních vodíků}$$

Jsou-li přítomny různé skupiny = $(n_{\text{A}}+1) \cdot (n_{\text{B}}+1) \dots$

- Počet linií – 1 = počet vodíků v sousední skupině (skupinách)
- Ze vzdálenosti linií lze odečíst velikost interakční konstanty J (Hz)
- Interakce jsou vzájemné = je-li H_{A} multipletem v důsledku interakce s H_{B} , musí být H_{B} multipletem v důsledku interakce s H_{A} . Multiplicita H_{A} a H_{B} se může lišit, ale velikost interakční konstanty je stejná.

Spektra ^1H NMR ... Multiplicita signálu



Všechny uvedené signály mají intenzitu 1H

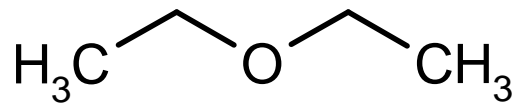
0	1	Singlet (s)
1	1 1	Dublet (d)
2	1 2 1	Triplet (t)
3	1 3 3 1	Kvartet (q)
4	1 4 6 4 1	Kvintet (kv)
5	1 5 10 10 5 1	Sextet (sex)
6	1 6 15 20 15 6 1	Septet (sep)
7	1 7 21 35 35 21 7 1	Oktet (o)
8	1 8 28 56 70 56 28 8 1	Nonet (n)

!!! Všechny NMR signály !!!

!!! jsou symetrické !!!

Intenzita jednotlivých linií může být v důsledku „střečového efektu“ různá, avšak pozice linií je symetrická.

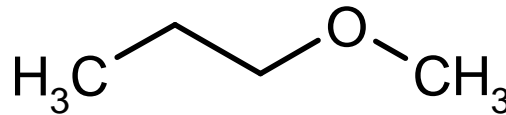
Určete počet signálů, jejich poměr a multiplicitu látek C₄H₁₀O



2

3 : 2

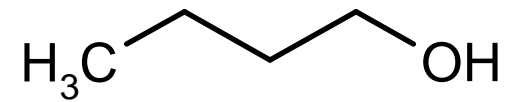
t q



4

3 : 2 : 2 : 3

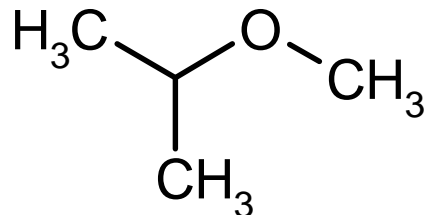
t q-t t s



5

3 : 2 : 2 : 2 : 1

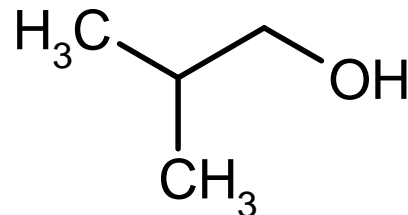
t q-t t-t t s



3

6 : 1 : 3

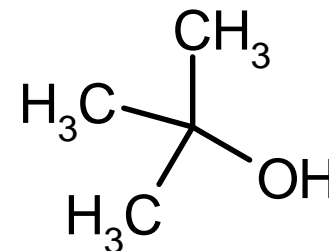
d sep s



4

6 : 1 : 2 : 1

d t-sep d s



2

9 : 1

s s

