

C8953
NMR strukturní analýza
seminář

Určovanie štruktúry malých molekúl pomocou NMR

Martin Babinský
martbab@chemi.muni.cz

11. mája 2011

Princíp určovania štruktúry z NMR spektier

Postup od jednoduchších spektier k zložitejším

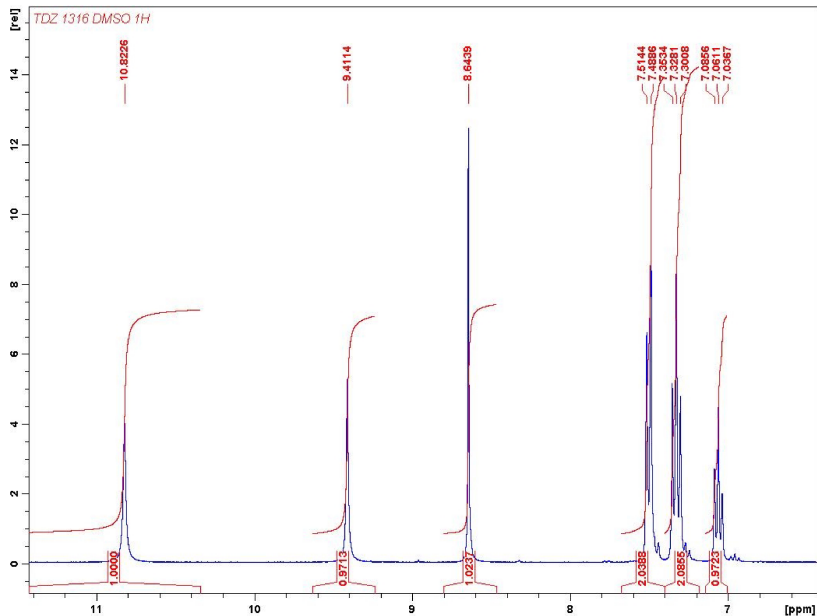
1. 1D ^1H - počet, poloha, intenzita, štiepenie
2. 1D ^{13}C - dtto
3. APT - CH, CH_3 vs. CH_2 , C_q
4. HSQC/HMQC - prepojenie ^1H s ^{13}C
5. COSY, TOCSY, (NOESY) - korelácia medzi ^1H
6. HMBC - korelácia medzi ^1H a ^{13}C (^{15}N , ...)
7. zostavenie a spojenie štruktúrnych fragmentov

Neznáma látka

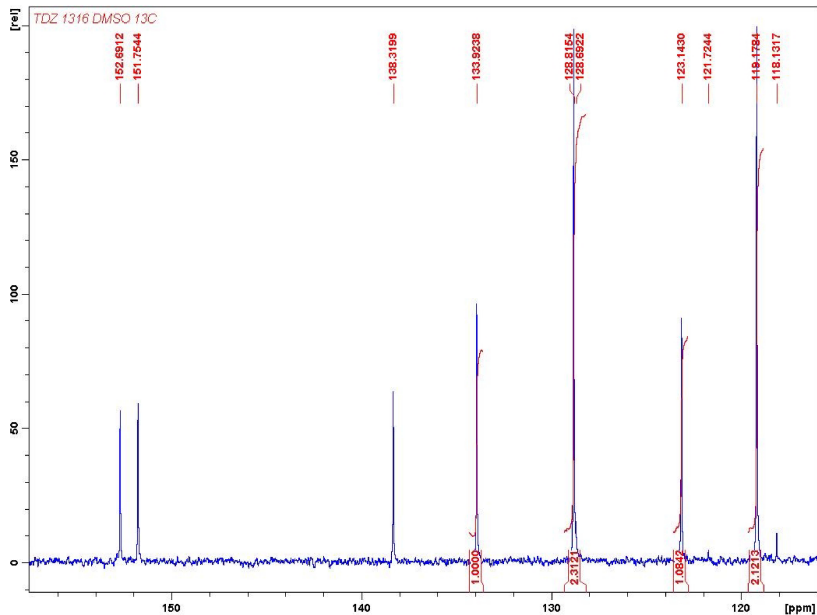
Defoliant na báze síry

- ▶ $M_r = 224 \text{ g mol}^{-1}$
- ▶ Sumárny vzorec: $\text{H}_8\text{C}_9\text{N}_4\text{SO}$
- ▶ IR pásy: C=O, N=N, S-N

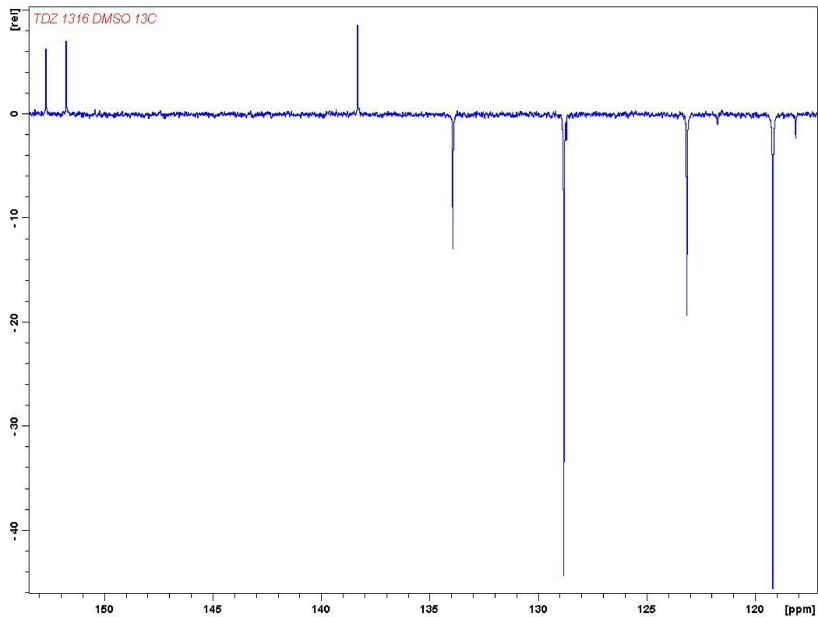
1D ^1H spektrum v DMSO



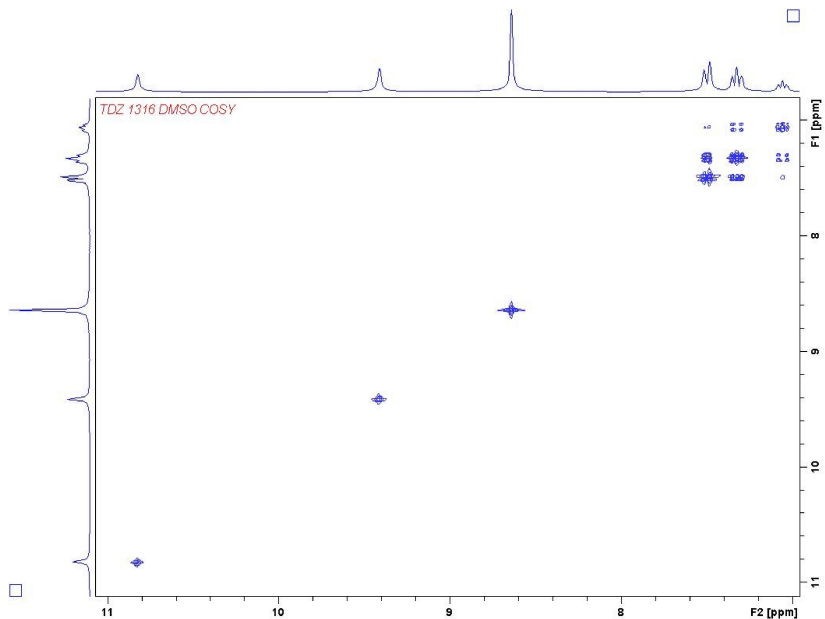
1D ^{13}C spektrum v DMSO



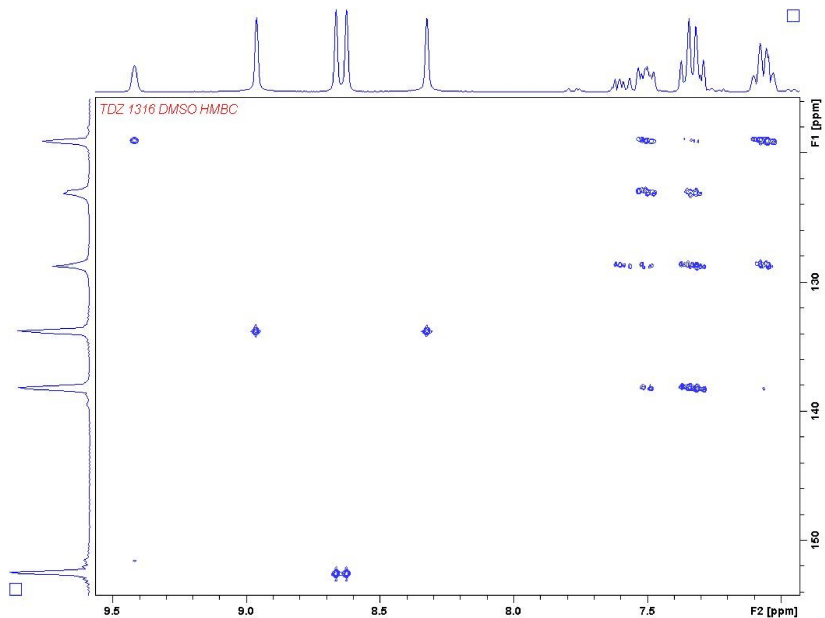
^{13}C APT spektrum v DMSO



$(^1\text{H}, ^1\text{H})$ -COSY spektrum v DMSO

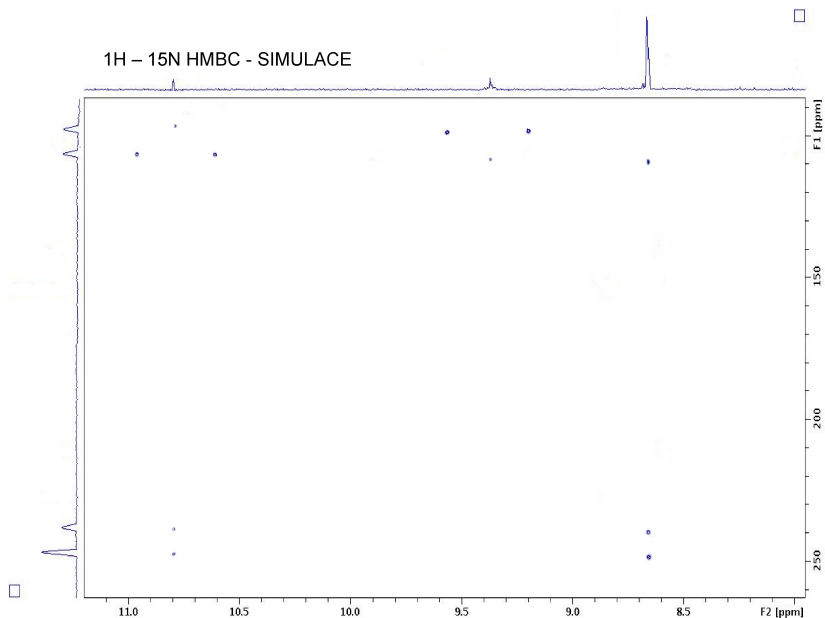


$(^1\text{H}, ^{13}\text{C})\text{-HMBC v DMSO}$



$(^1\text{H}, ^{15}\text{N})\text{-HMBC v DMSO}$

1H - 15N HMBC - SIMULACE

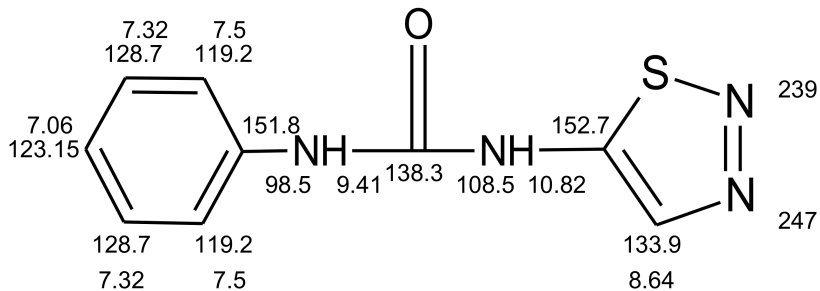


Riešenie

thidiazurón

Riešenie

thidiazurón



Nabudúce

Zápočtová úloha