

## NMR a energiové hladiny

### Přehled vztahů

$\nu$  v Hz,  $\omega$  v rad,  $\delta$  v ppm, Planckova konstanta  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  J.s,  $\gamma_{H^+} = 2,675 \cdot 10^8$  rad.s<sup>-1</sup>.T<sup>-1</sup> magnetogyrický poměr protonu.

$$E = h\nu, \quad \omega = 2\pi\nu$$

$$\omega_0 = -\gamma(1 + \delta)B_0 \quad \delta \text{ je v ppm, nutno nasobit } 10^{-6}$$

$$\delta = \frac{\nu - \nu_{\text{standard}}}{\nu_{\text{standard}}} \cdot 10^6, \quad \delta = \frac{\nu - \nu_{\text{standard}}}{\nu_{\text{spektrometr}}} \cdot 10^6$$

$$E_{m_1 m_2} = m_1 \nu_{0,1} + m_2 \nu_{0,2} + m_1 m_2 J_{12}$$

$$E_{m_1 m_2 m_3} = m_1 \nu_{0,1} + m_2 \nu_{0,2} + m_3 \nu_{0,3} + m_1 m_2 J_{12} + m_1 m_3 J_{13} + m_2 m_3 J_{23}$$

### DÚ

Najděte si na internetu protonové spektrum Ethanolu a Methanolu. Jdou tyto látky odlišit? Zamyslete se nad štěpením a poměrem intenzit čar u ethanolu.

### Příklady

1)

V laboratoři budeme mít NMR spektrometry 300 MHz a 950 MHz. Určete jejich sílu magnetického pole.

2)

Ve spektru, naměřeném na 600 MHz spektrometru se stanovenou hodnotou 600 MHz pro proton TMS, vidíme 2 frekvence. První je od TMS (tetramethyl silan, standard pro protony) s frekvencí 600 000 200 Hz a druhou našeho vzorku s frekvencí 600 002 000 Hz. Přepočítejte frekvence ve spektru na chemické posuny  $\delta$  v ppm. O kolik se liší výsledek podle různých definic?

3)

Na spektrometru z příkladu 2 měříme vzorek, který poskytne 2 signály, jejichž rozdíl je 2,5 ppm. Jaký je rozdíl jejich frekvencí? Jak se změní rozdíl frekvencí, když použijeme spektrometr s magnetickým polem o 7 T?

4)

Máme systém 2 magneticky aktivních jader, které mohou nabývat pouze 2 stavů ( $\alpha, \beta$ ). Jejich vzájemná skalární interakční konstanta je  $J_{12} = 8$  Hz. Jak bude vypadat spektrum, když by samotná jádra měla chemické posuny 1 a 2 ppm na dostatečně silném spektrometru (100 MHz a více zajistí, že mezi nimi nebude silná interakce, viz přednáška)? Proč se interakční konstanta měří v Hz a ne v ppm? Kde všude lze ze spektra určit hodnotu  $J_{12}$ .

5)

Máme systém 3 magneticky aktivních jader, které mohou nabývat pouze 2 stavů ( $\alpha, \beta$ ). Jejich vzájemné skalární interakční konstanty jsou  $J_{12} = 6$  Hz,  $J_{13} = 10$  Hz a  $J_{23} = 14$  Hz. Jak bude vypadat spektrum, když by samotná jádra měla frekvence  $-100$ ,  $-150$  a  $-300$  Hz? Jak by se změnilo spektrum, kdyby  $J_{12} = J_{13}$ ? Napočítejte energiové hladiny a určete přechody, které jsou vidět ve spektru.

Sheet1

Stav	Magnetické kvantové číslo			Frekvence v Hz			Skalární interakční konstanty v Hz			Výsledná frekvence (energie) stavu, Hz
	m1	m2	m3	f1	f2	f3	J12	J13	J23	
				-100	-150	-300	6	10	14	
1	0.5	0.5	0.5							
2	-0.5	0.5	0.5							
3	0.5	-0.5	0.5							
4	-0.5	-0.5	0.5							
5	0.5	0.5	-0.5							
6	-0.5	0.5	-0.5							
7	0.5	-0.5	-0.5							
8	-0.5	-0.5	-0.5							

Přechody, delta m =

+1, jediné pozorovatelné ve spektru

12,34,56,78	13,24,57,68	15,26,37,48

+2

14,16,17	28,38,58

0

23,25,35	46,47,67

+3

18

+1, ale nejdou vidět ve spektru

27,36,45

NAKRESLETE DIAGRAM PŘECHODŮ

NAKRESLETE SPEKTRUM