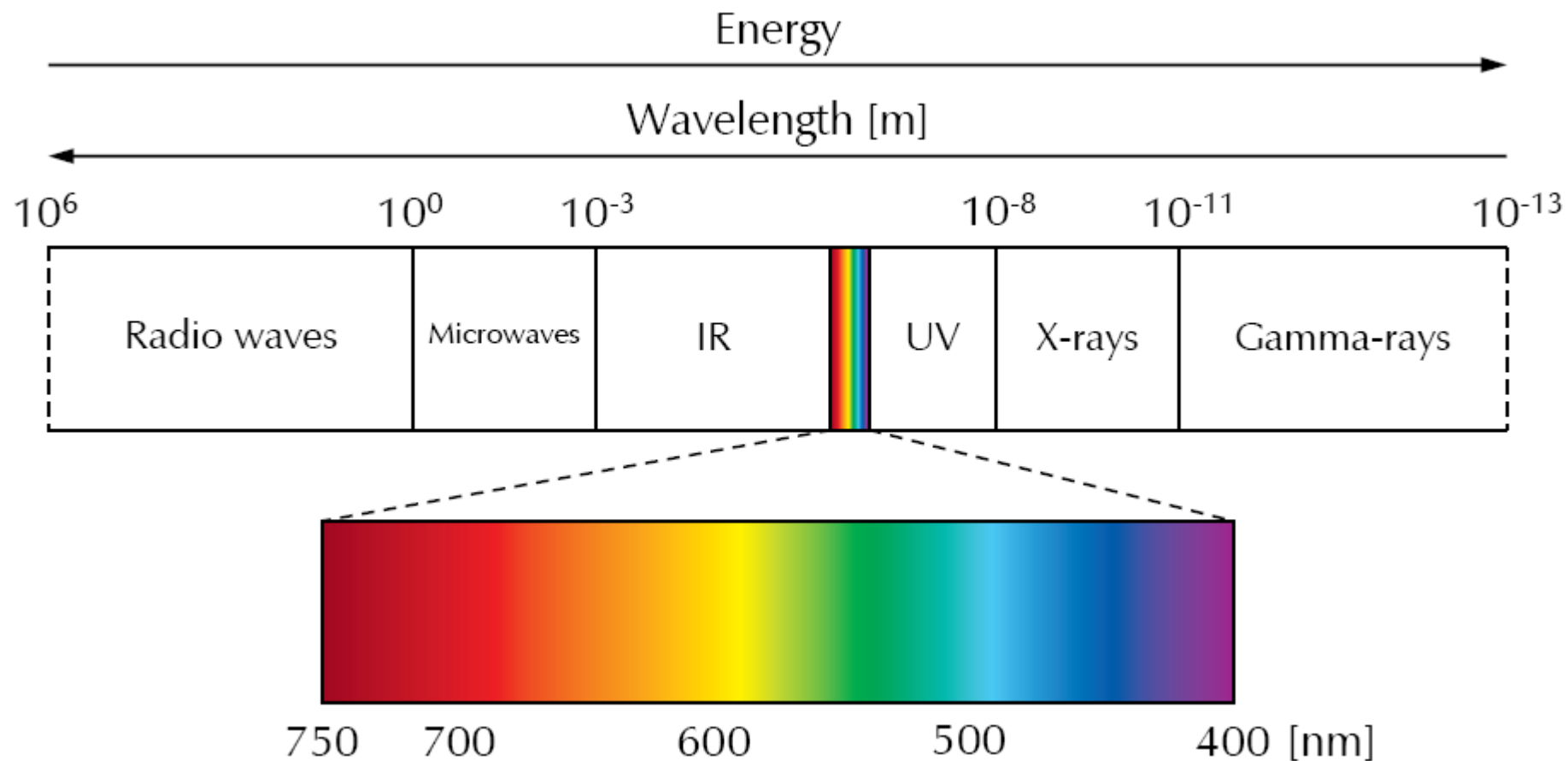
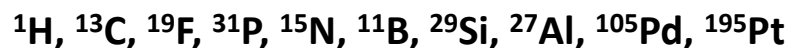


- možný vznik (směsi) tří různých produktů
- analytická metoda, umožňující identifikaci těchto produktů?  
(ideálně: rychle, malé množství, ve směsi)

- spektroskopie je obecně založena na interakci hmoty s elektromagnetickým zářením



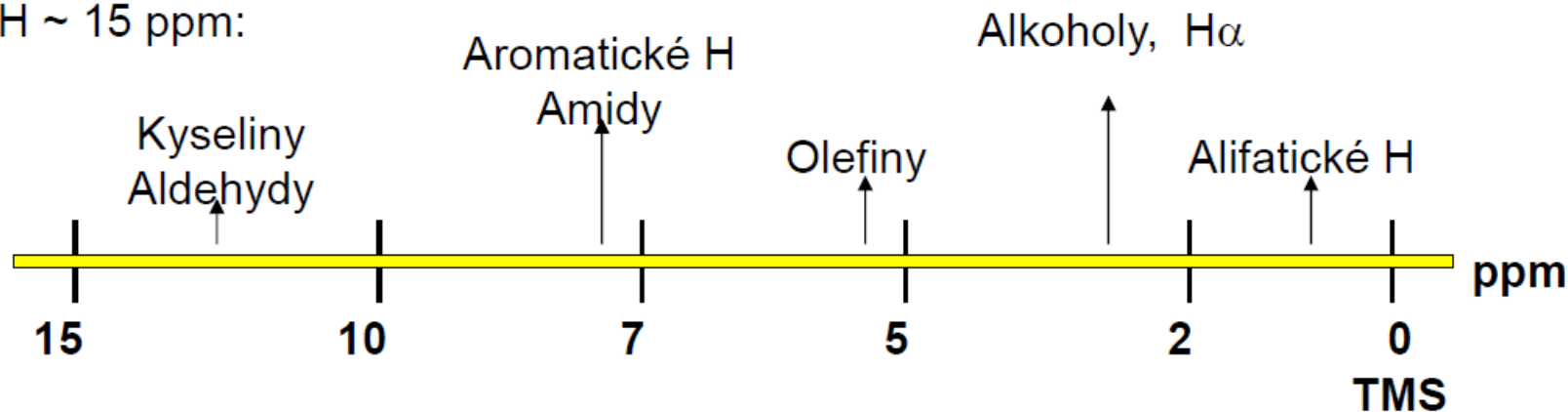
v NMR jde o absorpci **radiofrekvenčních vln** magneticky aktivními jádry ve vysokém magnetickém poli



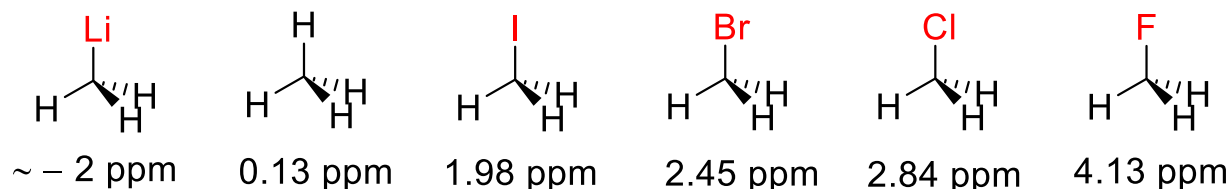


- Chemický posun je velmi důležitou kvalitativní veličinou – na každé jádro působí okolní jádra a elektrony svým magnetickým polem (stínění) → strukturní informace

•  $^1\text{H}$  ~ 15 ppm:

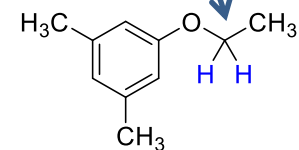
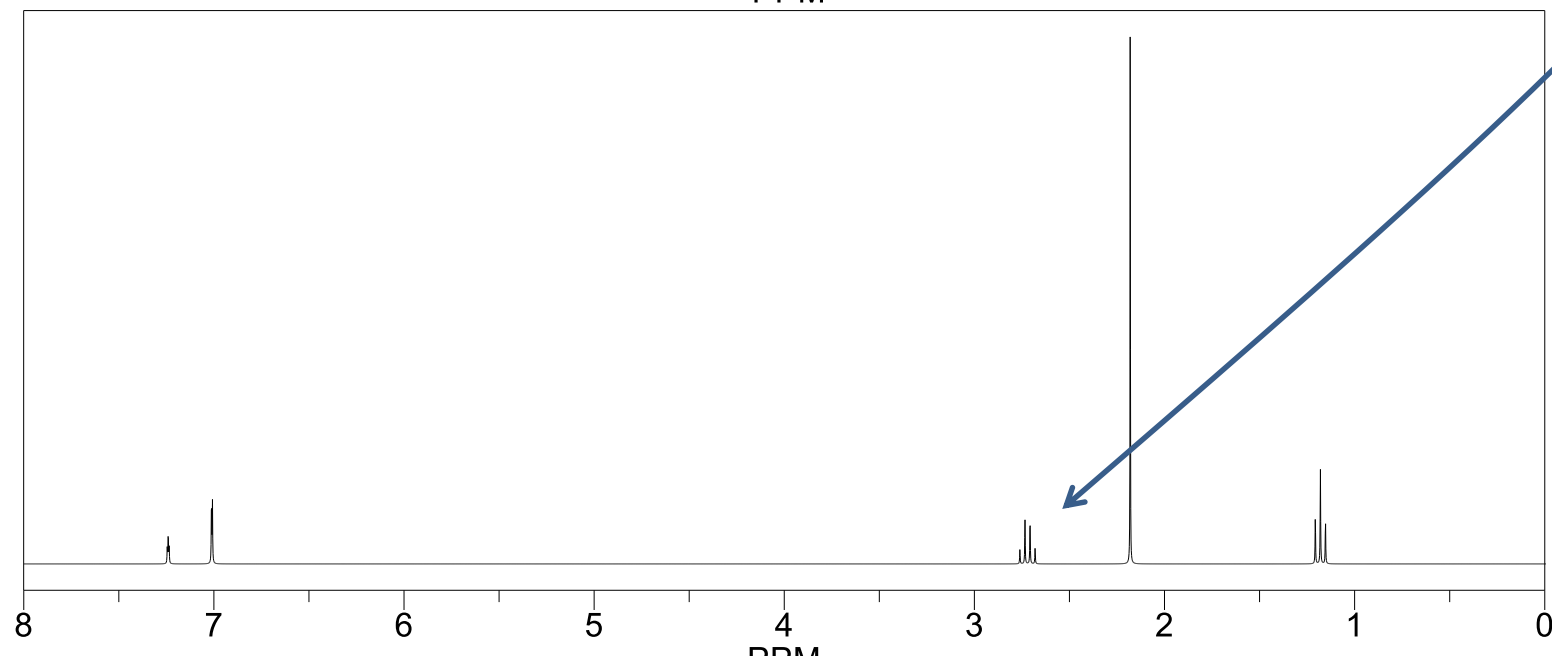
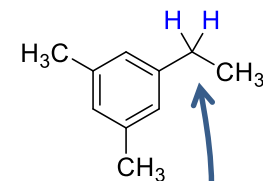
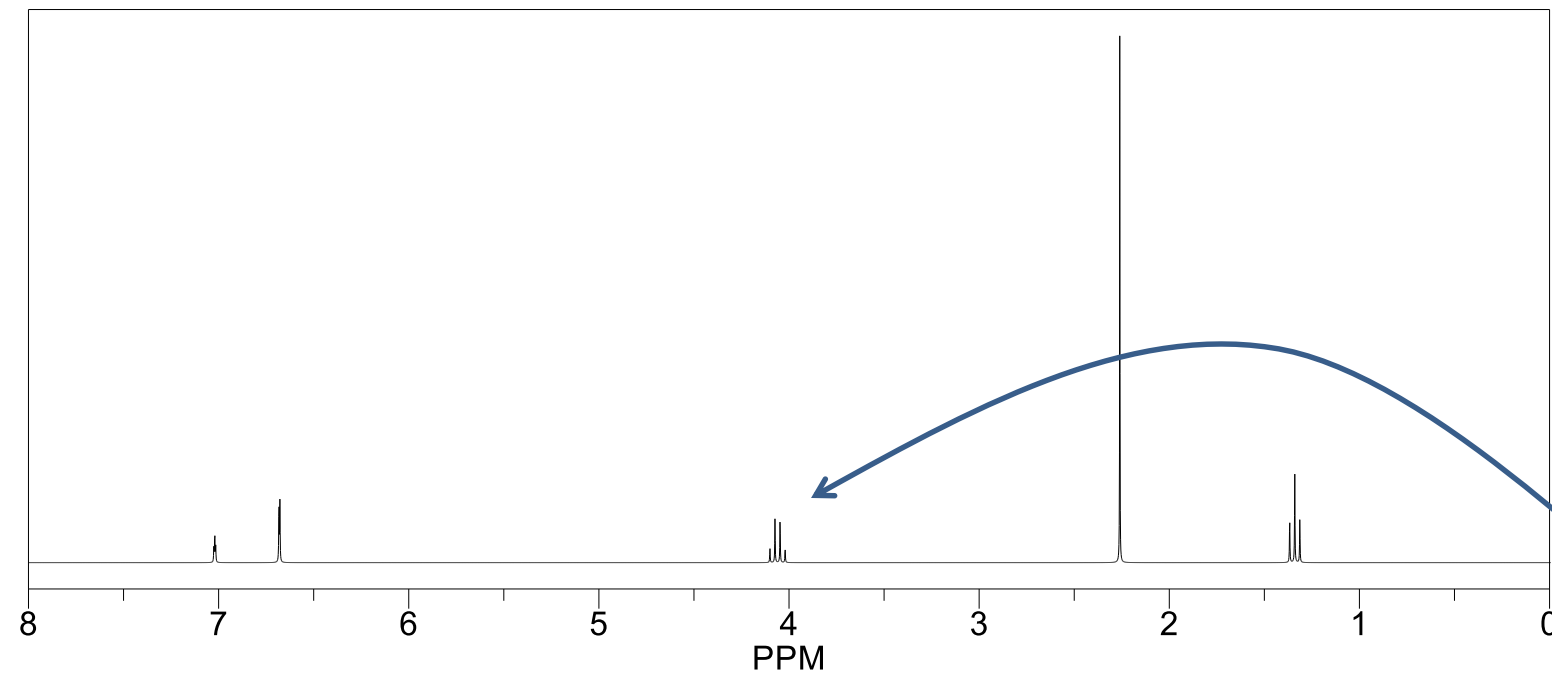


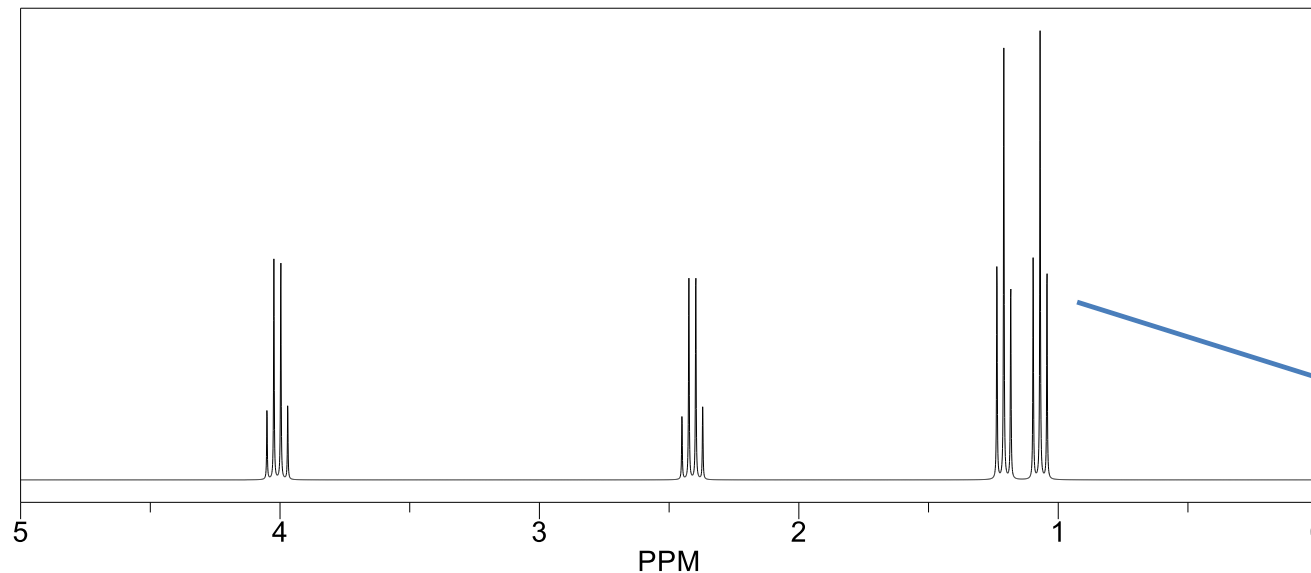
- Efekt elektronegativity na chemický posun methyl skupiny:



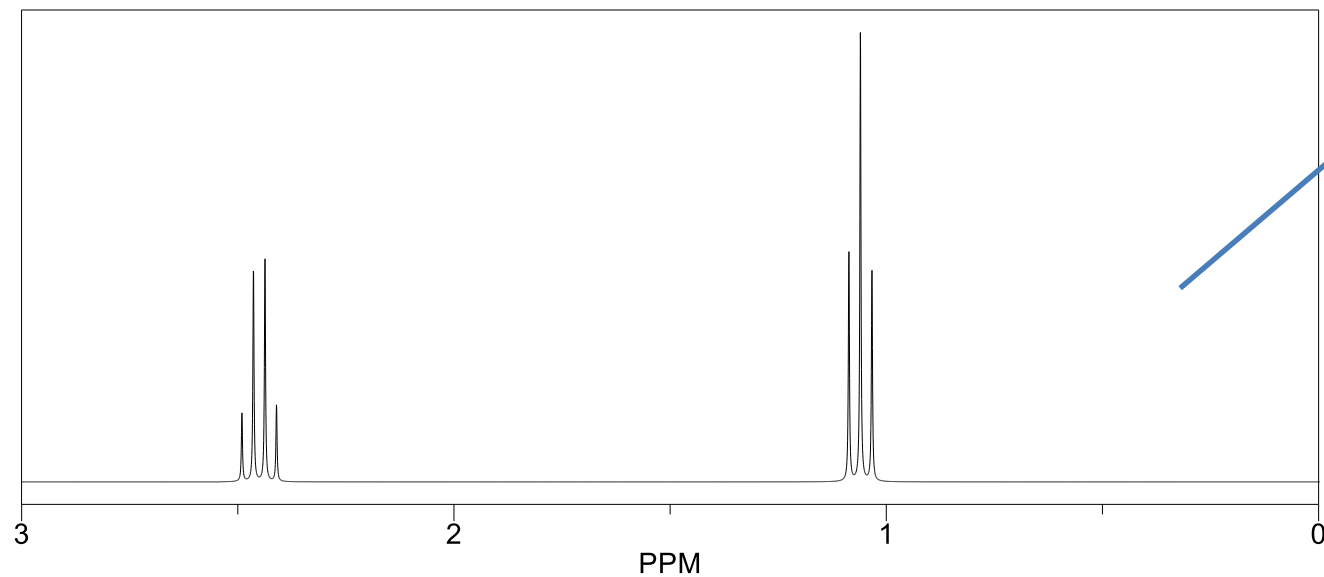
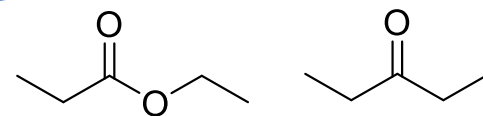
odlišná elektronegativita → odlišné stínění H → rozdílný chemický posun

- chemický posun odráží elektronické a stereochemické jevy, intra a intermolekulární interakce (H-vazby,  $\pi$ - $\pi$  interakce, interakce s rozpouštědlem...) → závisí na použitém rozpouštědle





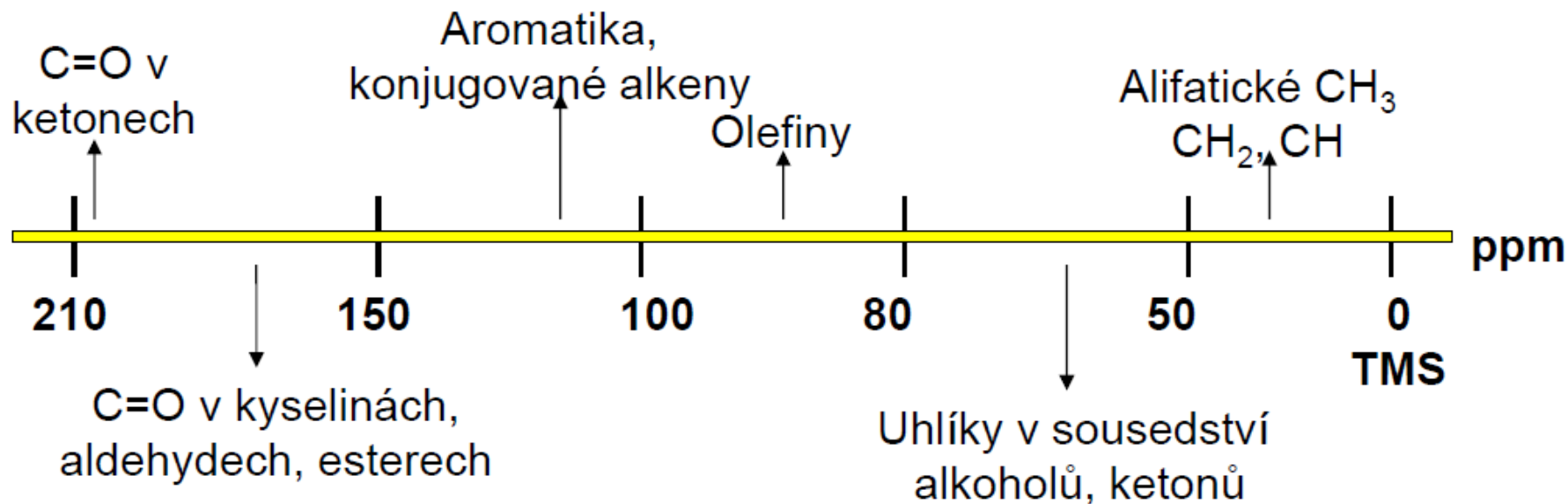
- které molekule odpovídá  $^1\text{H}$  NMR spektrum ?



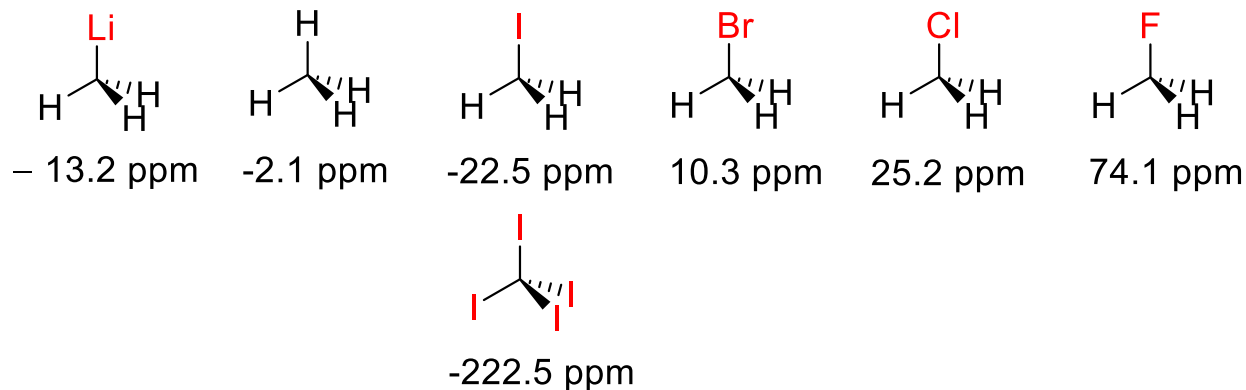


## $^{13}\text{C}$ NMR chemické posuny

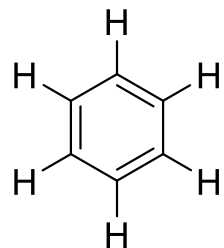
$^{13}\text{C} \sim 220$  ppm:



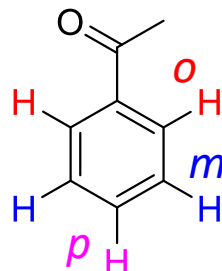
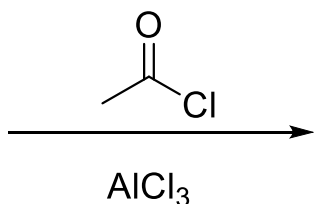
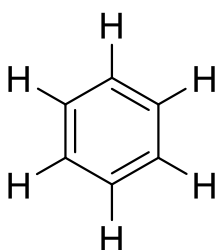
## Efekt elektronegativity + stínění elektrony na chemický posun methyl skupiny:



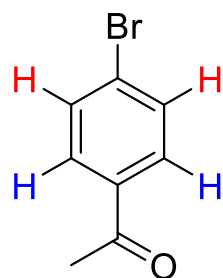
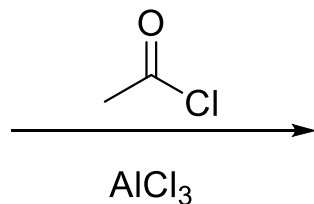
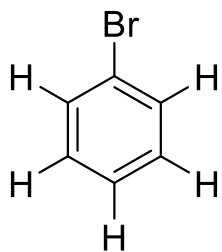
- Počet signálů ve spektru odráží symetrii molekuly – rozlišení isomerů apod.



všech 6 atomů H i C je ekvivalentních – ztotožnitelných operací symetrie → pouze jeden signál v  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  spektru

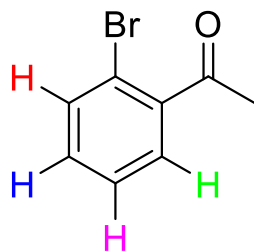
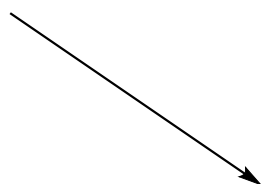


zavedením substituentu na jádro se snížila symetrie a počet aromatických signálů bude 3 – ortho, meta, para a jejich integrální intenzita v poměru 2:2:1



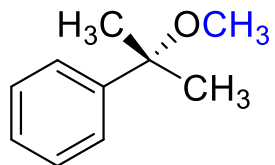
zavedením druhého substituentu na jádro se opět změnila symetrie a počet aromatických signálů bude 2, v poměru 2:2 → 1:1

3  $^1\text{H}$  signály

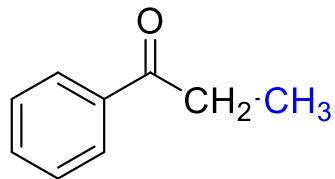
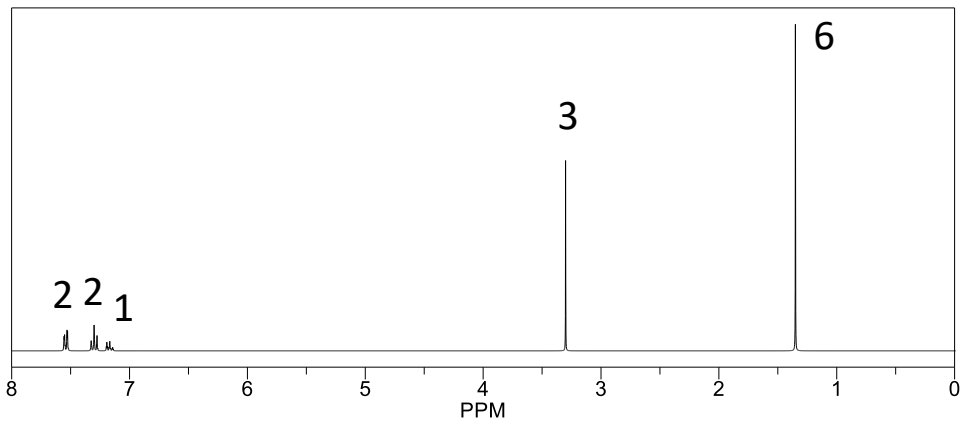


acylací do ortho polohy se opět změnila symetrie a všechny polohy jsou chemicky a magneticky neekvivalentní - počet aromatických signálů bude 4, v poměru 1:1:1:1

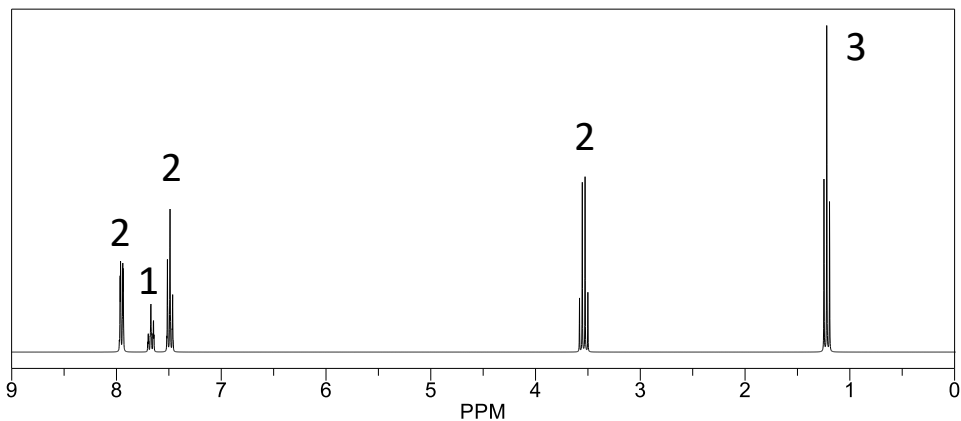
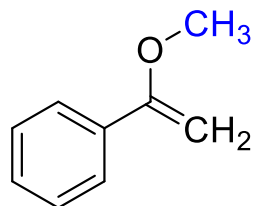
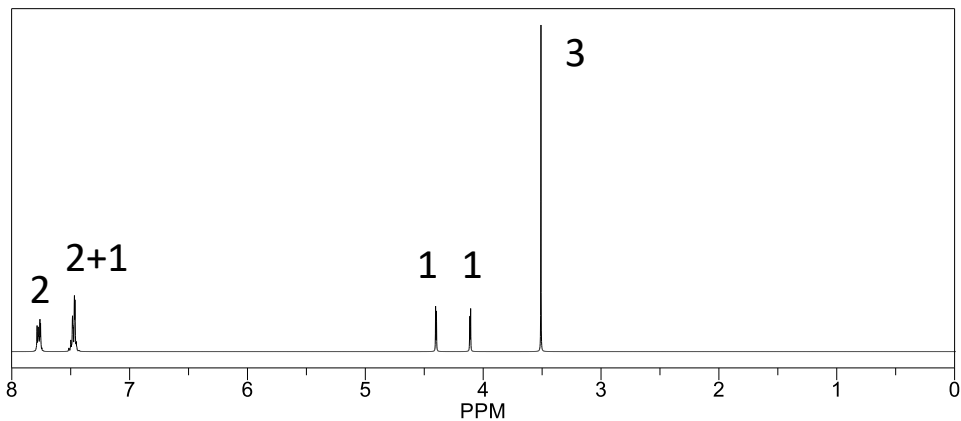
Pomocí IR nebo MS velmi obtížně či nerozlišitelné



VS.



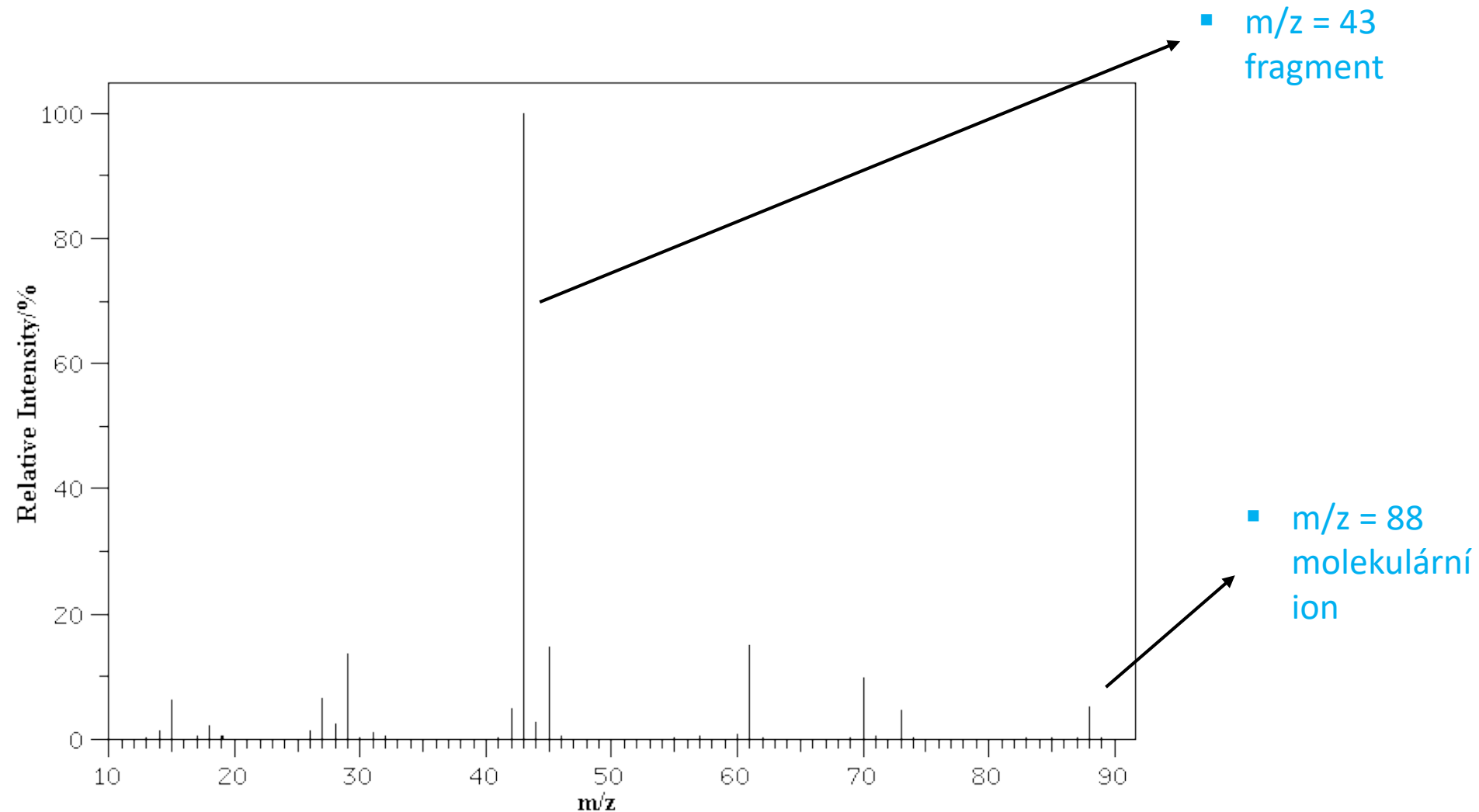
VS.







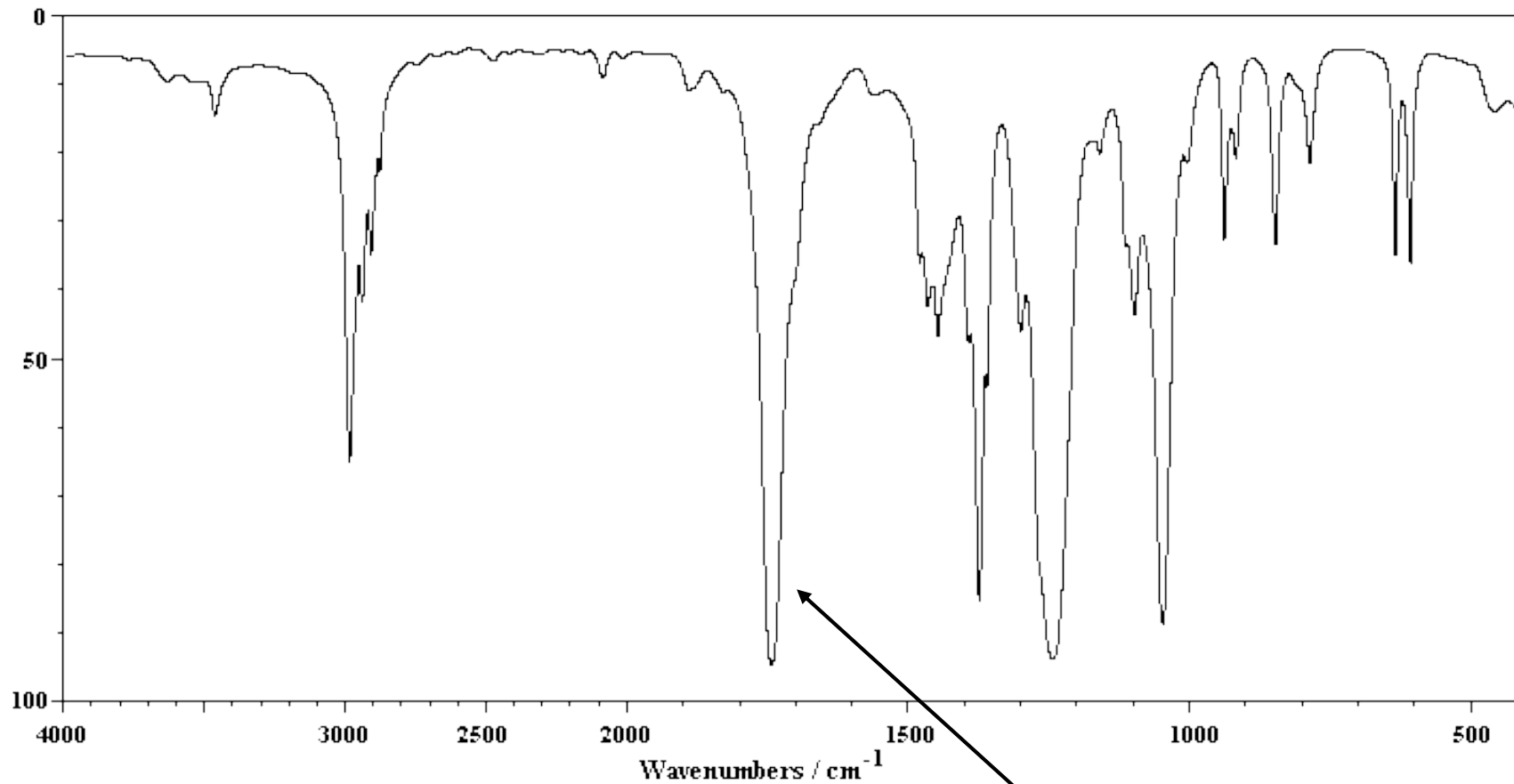
- Určete strukturu neznámého vzorku za pomoci MS, IR a NMR





- Určete strukturu neznámého vzorku za pomoci MS, IR a NMR

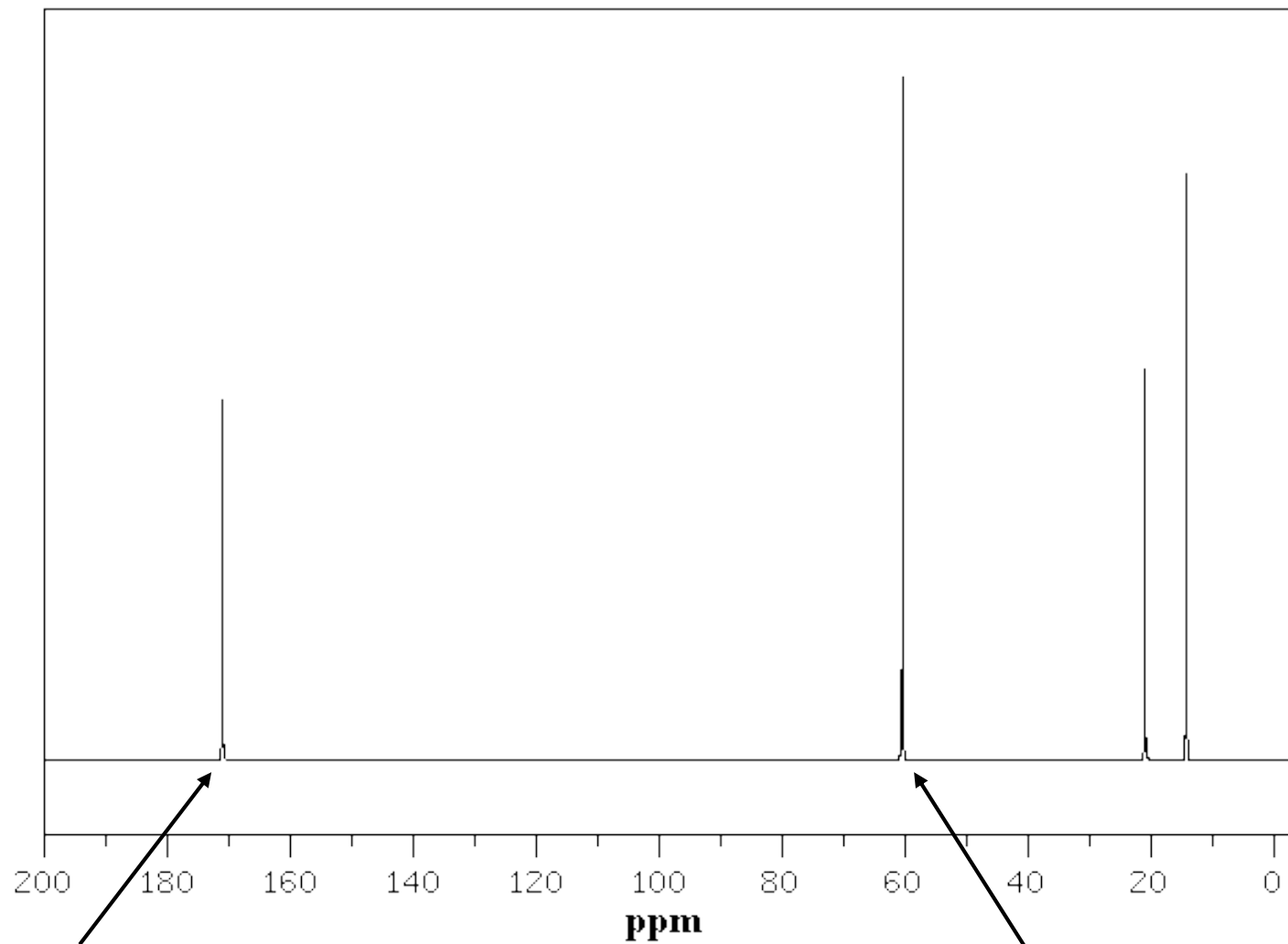
Absorbance / %    ▪ IR spektrum



- $\sim 1700 \text{ cm}^{-1}$ , vibrace C=O



- $^{13}\text{C}$  NMR spektrum



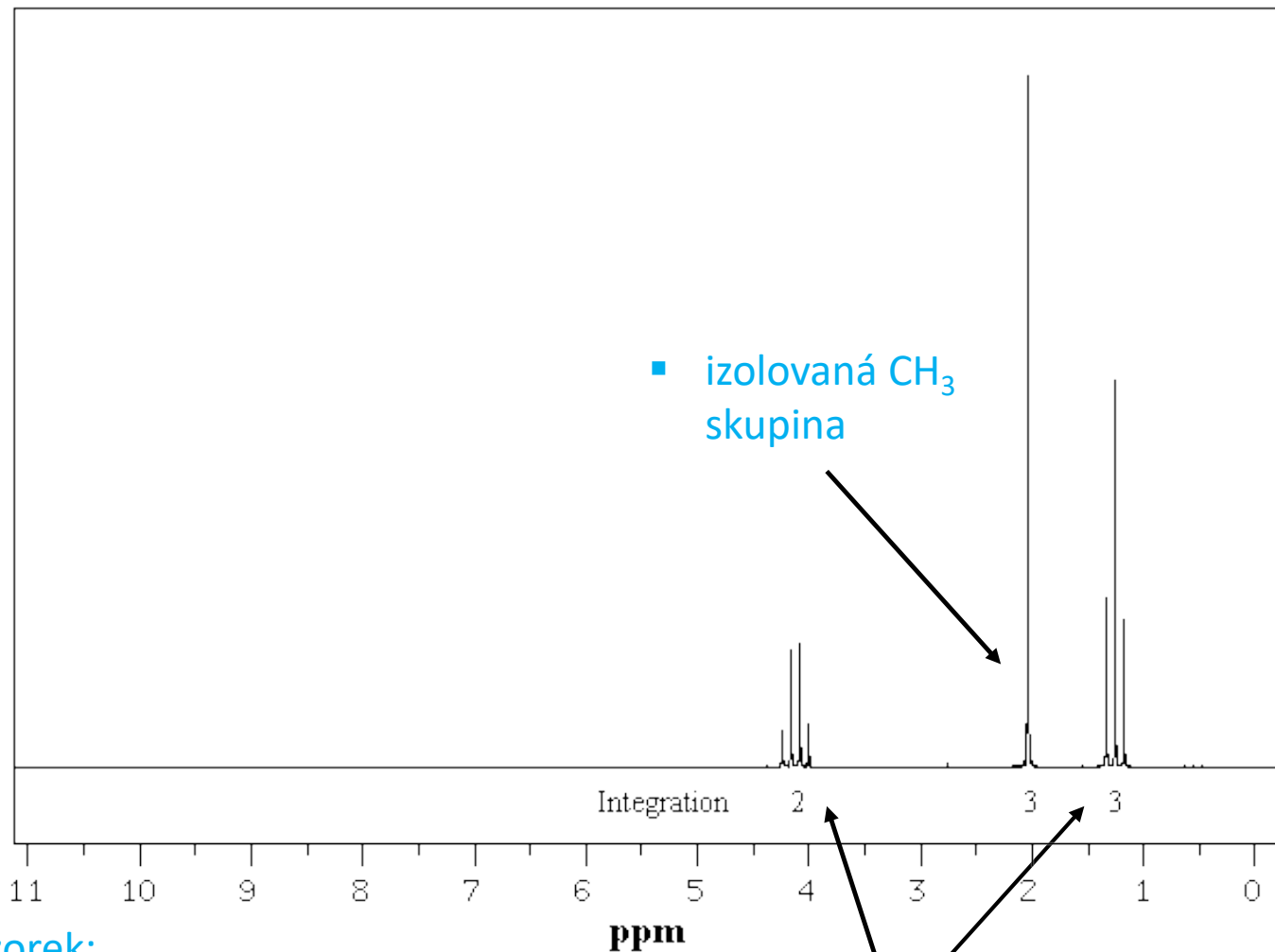
- C=O (karboxylová skupina, ester, anhydrid, amid)

- C-O skupina

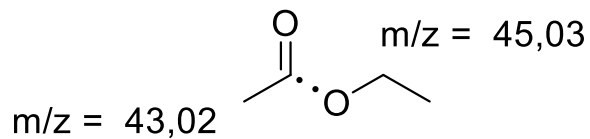
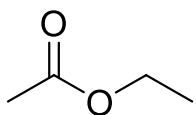
- 2 x C- alkyl



- $^1\text{H}$  NMR



- neznámý vzorek:



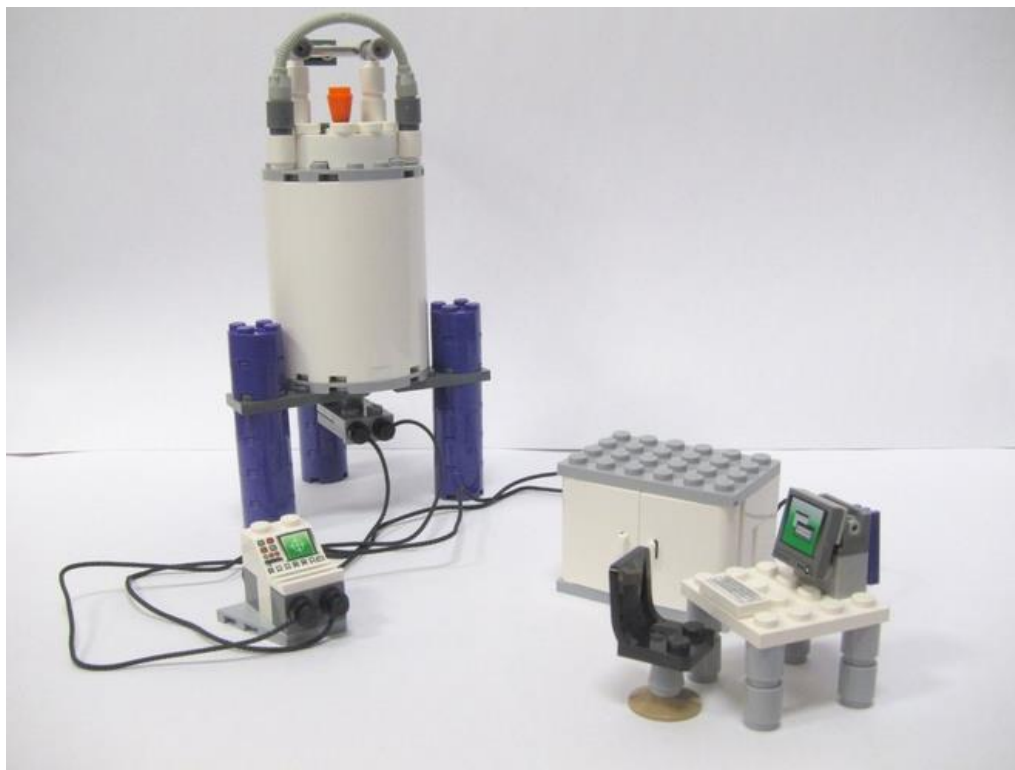
- $\text{CH}_3\text{-CH}_2$  skupina

## Nevýhody

- relativně velké nároky na prostor
- vysoká pořizovací cena
- relativně vysoké provozní náklady
- časová náročnost měření/interpretace dat
- nízká citlivost

## Výhody

- nedestruktivní
- v kapalně i pevné fázi
- detailní strukturní informace
- studium dynamických procesů



- **C8950** NMR - Strukturní analýza
- **C5320** Fyzikálně chemické základy

### NMR

- **C6770** NMR Spectroscopy of Biomolecules
- **C7998** Základy experimentální NMR
- ...