



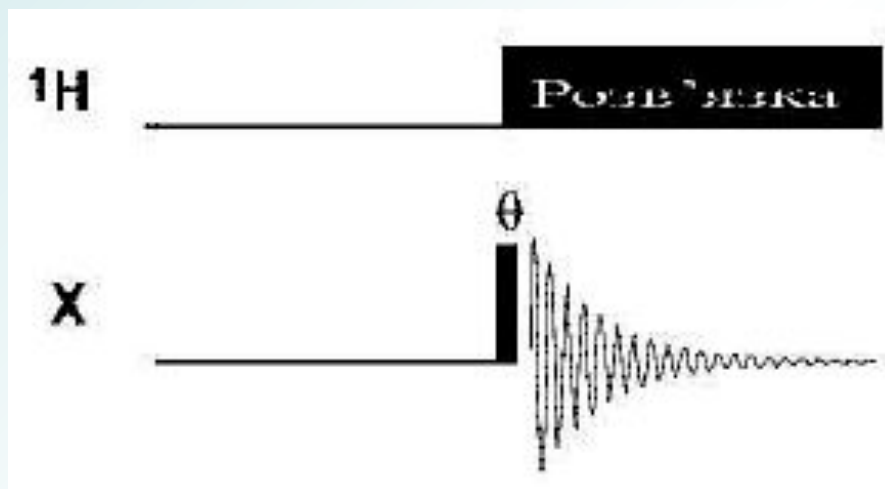
# ДЕКАПЛІНГ. ЯДЕРНИЙ ЕФЕКТ ОВЕРХАУЗЕРА.

## ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ В ЯМР



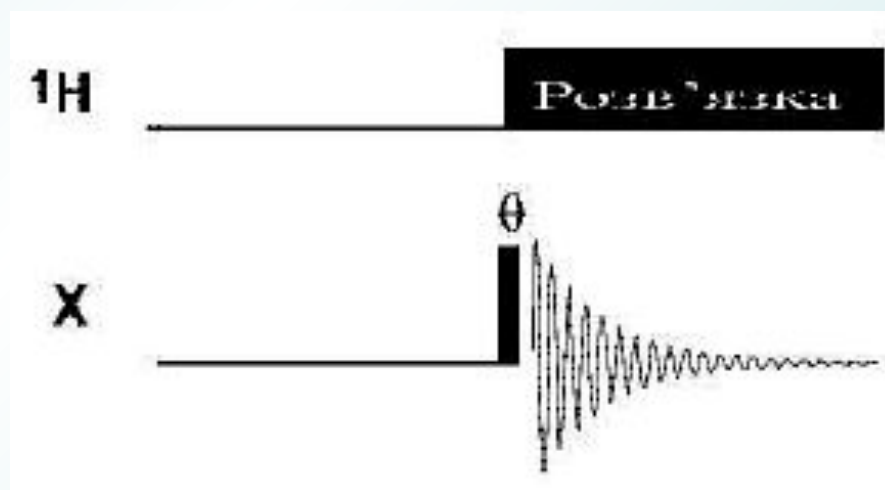
## ДЕКАПЛІНГ – ЕКСПЕРИМЕНТ, ЩО БАЗУЄТЬСЯ НА ДОДАТКОВОМУ ОПРОМІНЕННІ ЗРАЗКА

ШИРОКОПОЛОСНИЙ  
ДЕКАПЛІНГ



шумова  
модуляція

СЕЛЕКТИВНИЙ  
ДЕКАПЛІНГ



селективне  
опромінення на  
частоті  $\nu_i$  чи  
імпульс

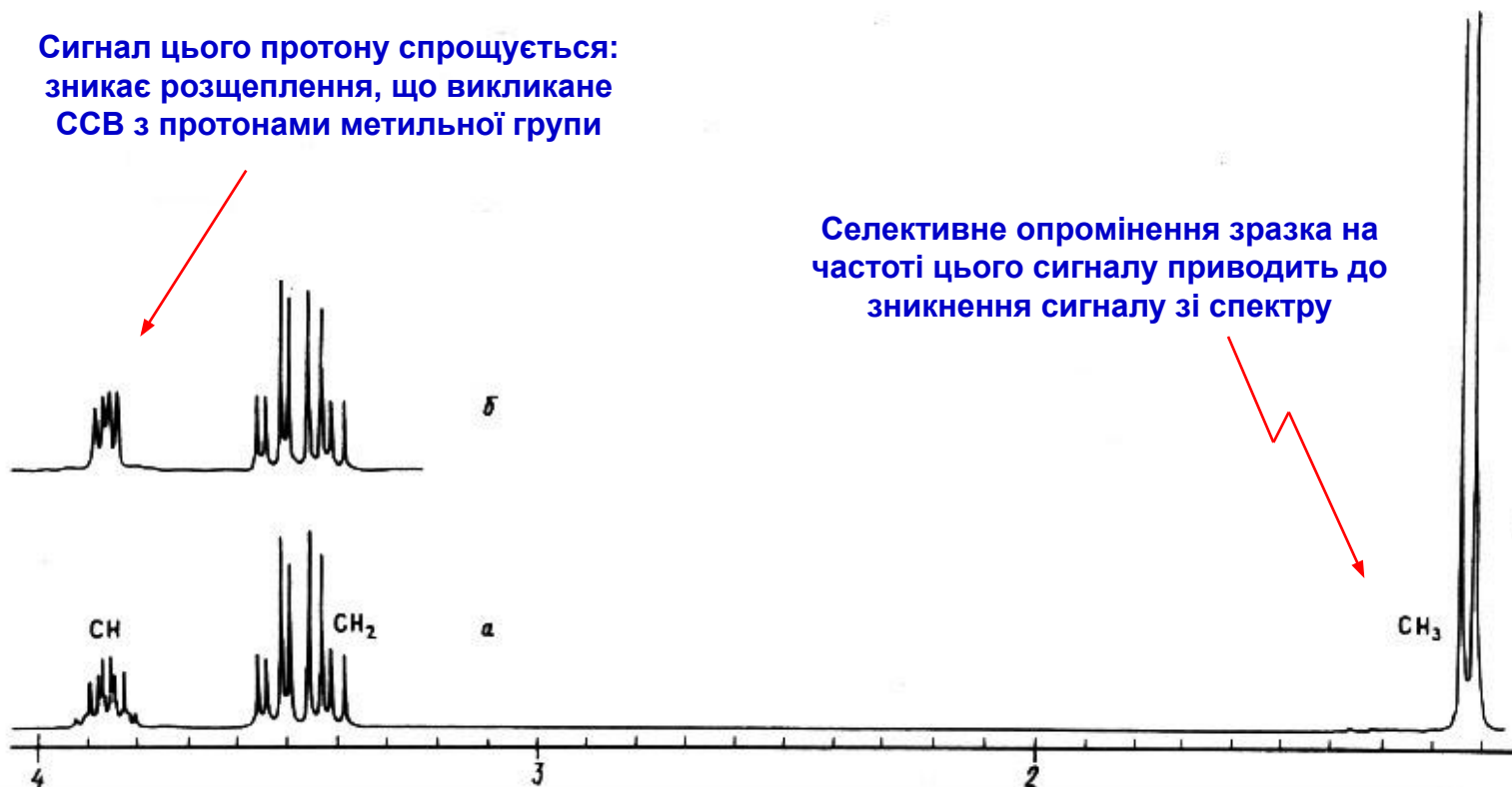


## ЯКІ НАСЛІДКИ ДОДАТКОВОГО ОПРОМІНЕННЯ СПОСТЕРІГАЮТЬСЯ В СПЕКТРІ ЯМР?

### $^1\text{H}$ -ЯМР спектр $\text{CH}_2\text{OH}-\text{CHOH}-\text{CH}_3$

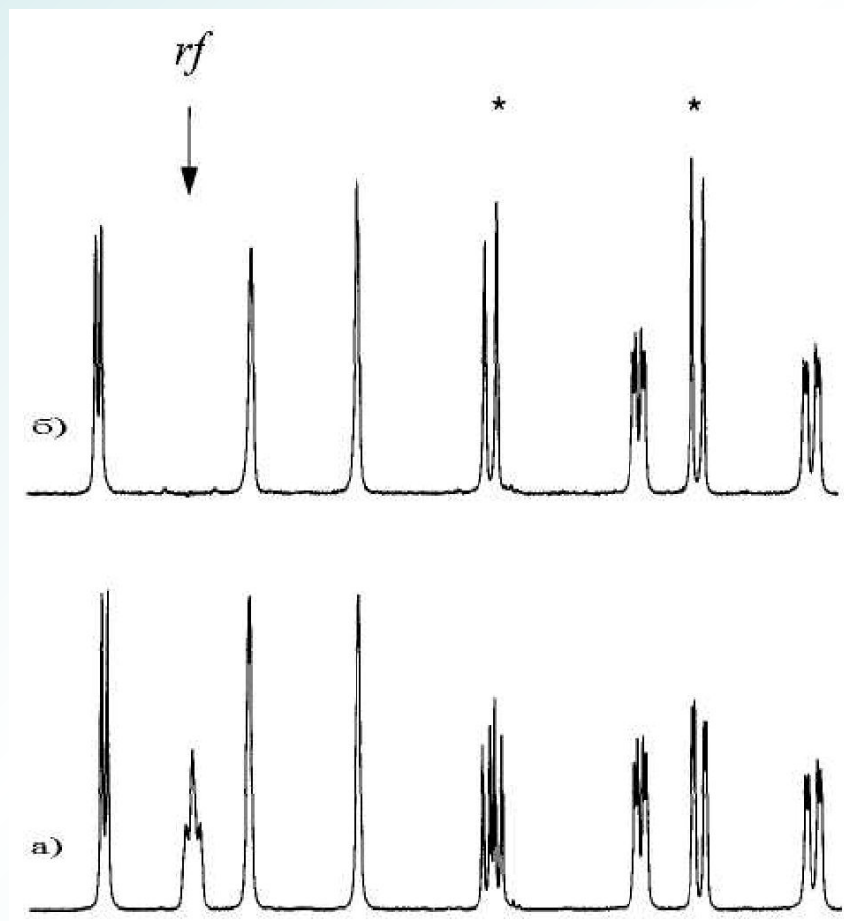
Сигнал цього протону спрощується:  
зникає розщеплення, що викликане  
ССВ з протонами метильної групи

Селективне опромінення зразка на  
частоті цього сигналу приводить до  
зникнення сигналу зі спектру



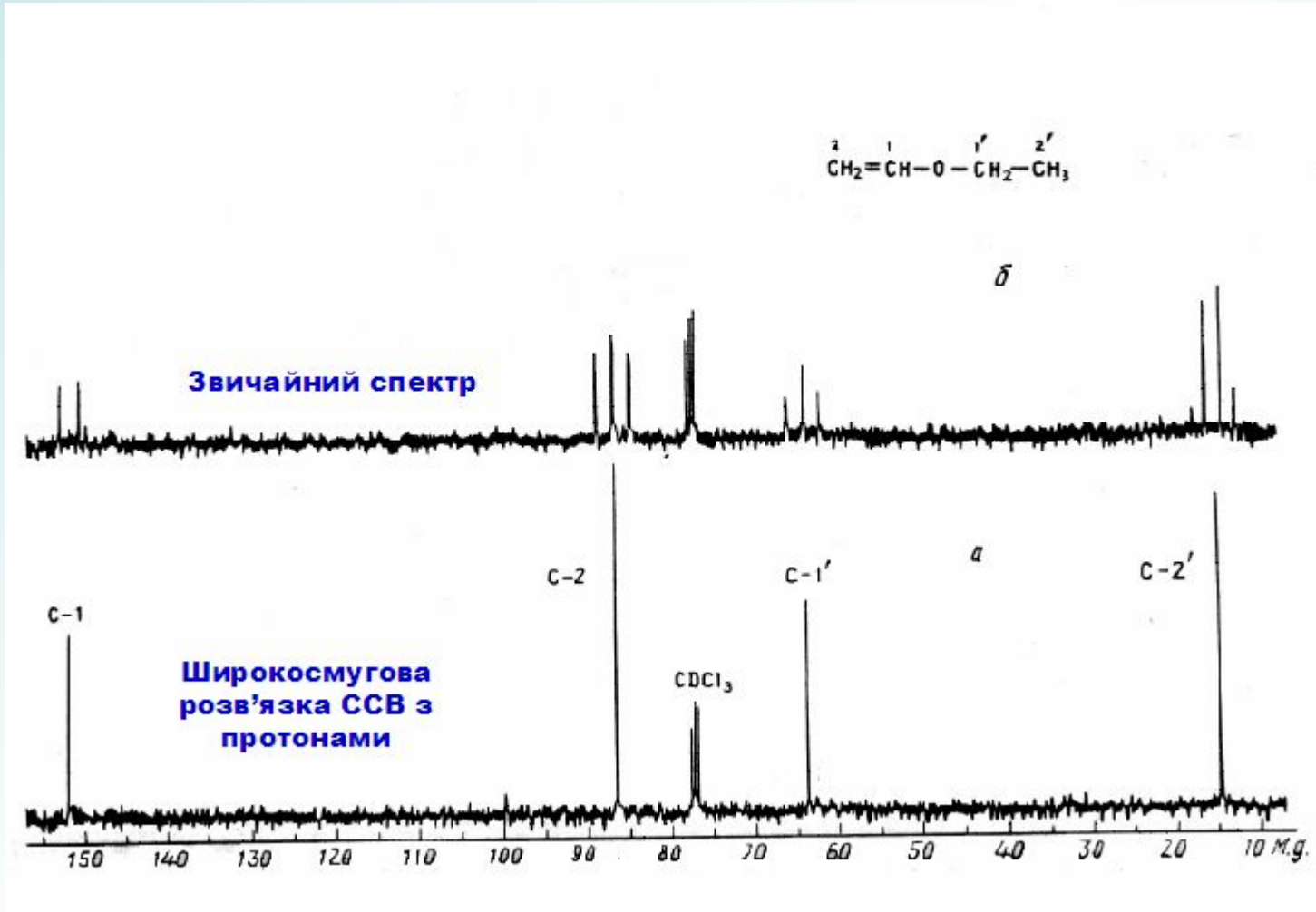


## ГОМОЯДЕРНИЙ ДЕКАПЛІНГ ДОЗВОЛЯЄ ШВИДКО ІДЕНТИФІКУВАТИ ПАРТНЕРІВ ПО ССВ



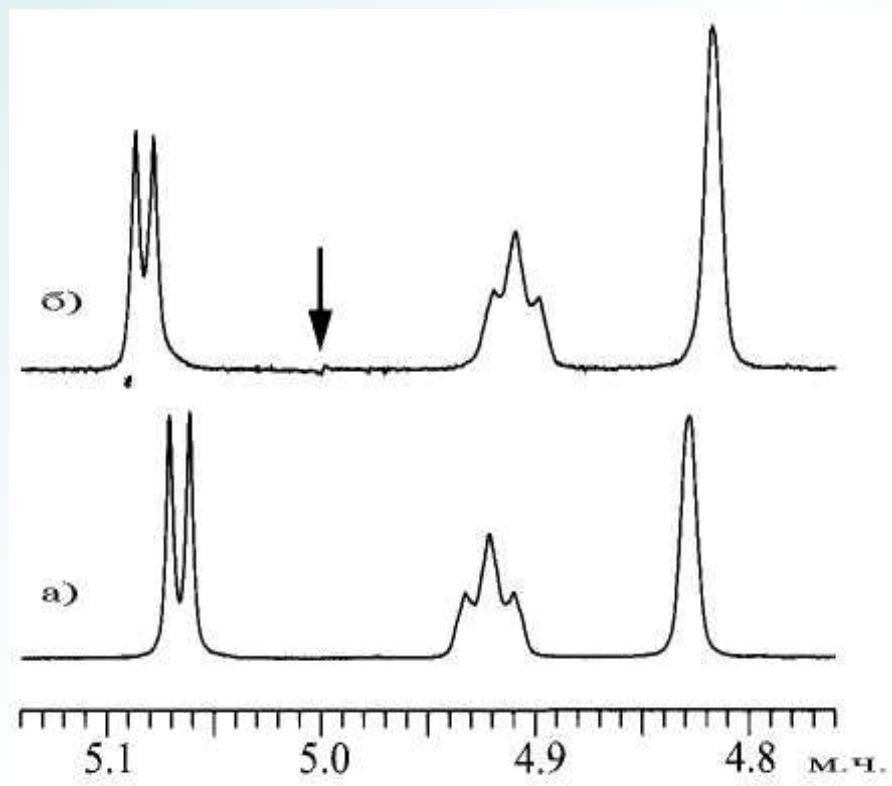


# ГЕТЕРОЯДЕРНИЙ ДЕКАПЛІНГ





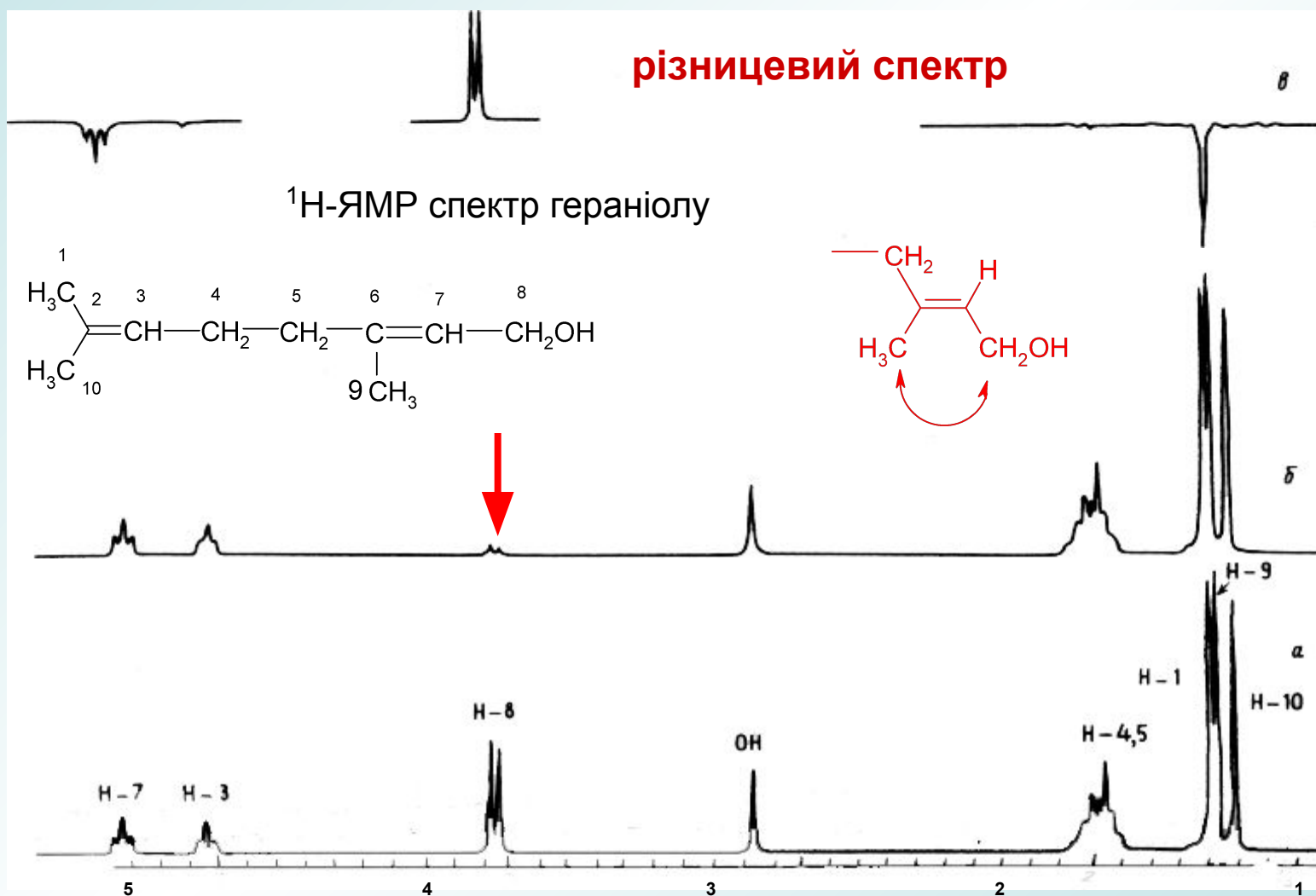
## ЗСУВИ БЛОХА-СИГЕРТА





# ЯДЕРНИЙ ЕФЕКТ ОВЕРХАУЗЕРА –

ЗМІНА ІНТЕНСИВНОСТІ СИГНАЛІВ ЯДЕР, ЩО ЗНАХОДЯТЬСЯ В ПРОСТОРИ ПОБЛИЗУ ЯДЕР, ЩО ДОДАТКОВО ОПРОМІНЮЮТЬСЯ





## ЯДЕРНИЙ ЕФЕКТ ОВЕРХАУЗЕРА (ЯЕО)

**> 0 для невеликих молекул (MW до ~500), < 0 для макромолекул**

**максимальна величина ЯЕО –  $1/2(\gamma_s/\gamma_i)$**

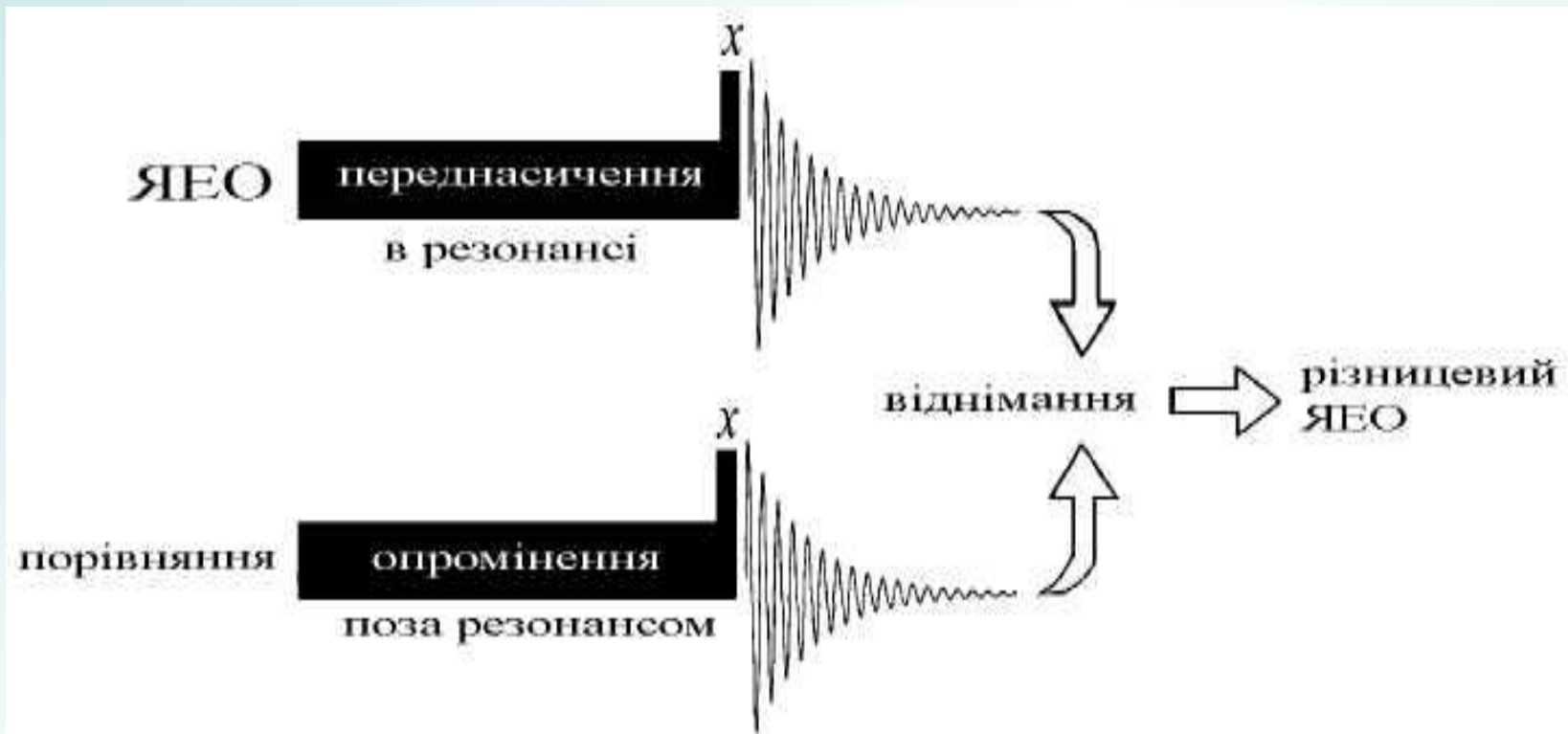
**ЯЕО  $\sim 1/r^6$ , де  $r$  – відстань між ядрами. На відстанях, більших за 3 Å, ЯЕО спостерігається рідко**

**коректно використовувати відносні величини ЯЕО**



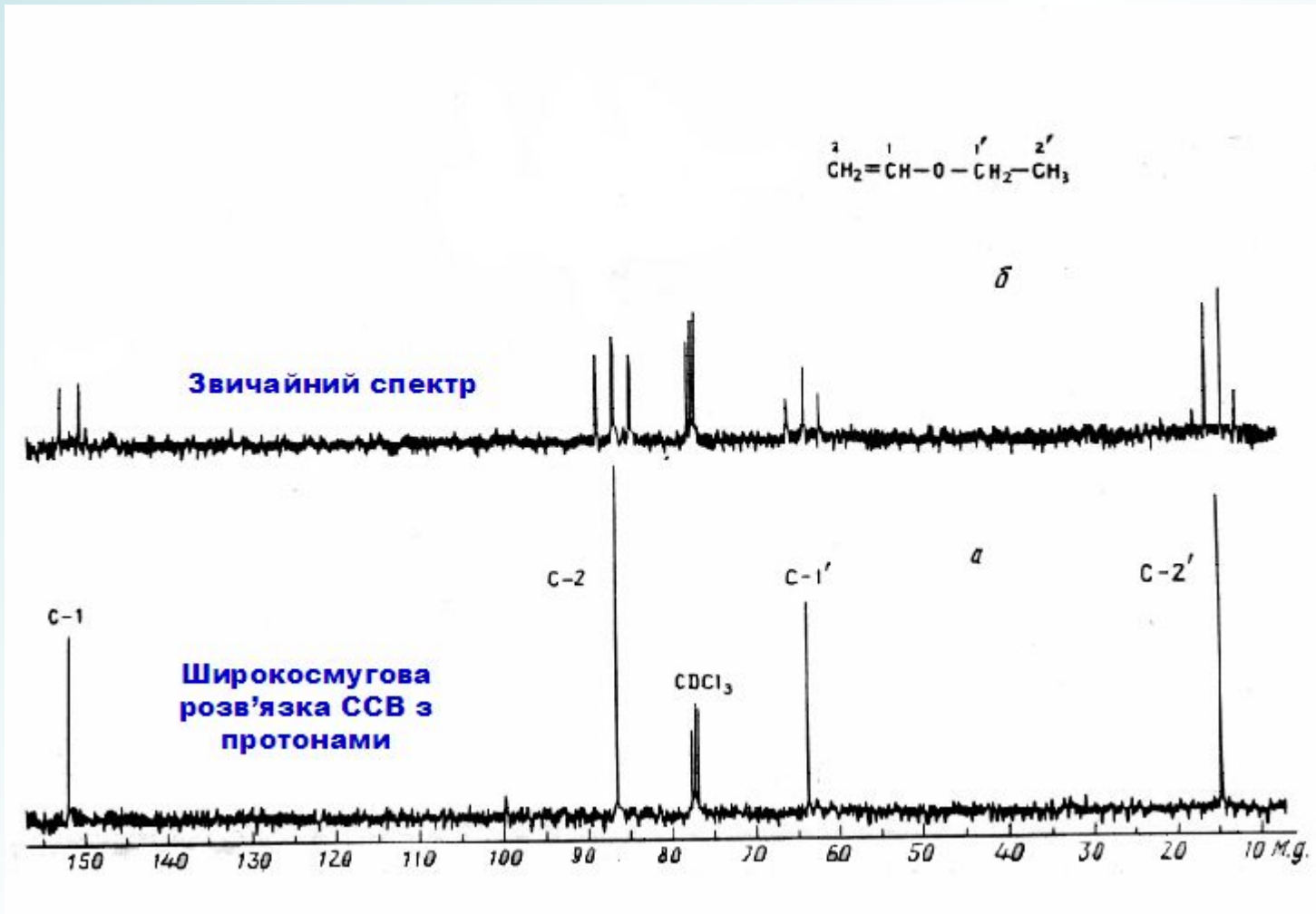


## ПРОЦЕДУРА ОТРИМАННЯ РІЗНИЦЕВОГО ЯЕО СПЕКТРА



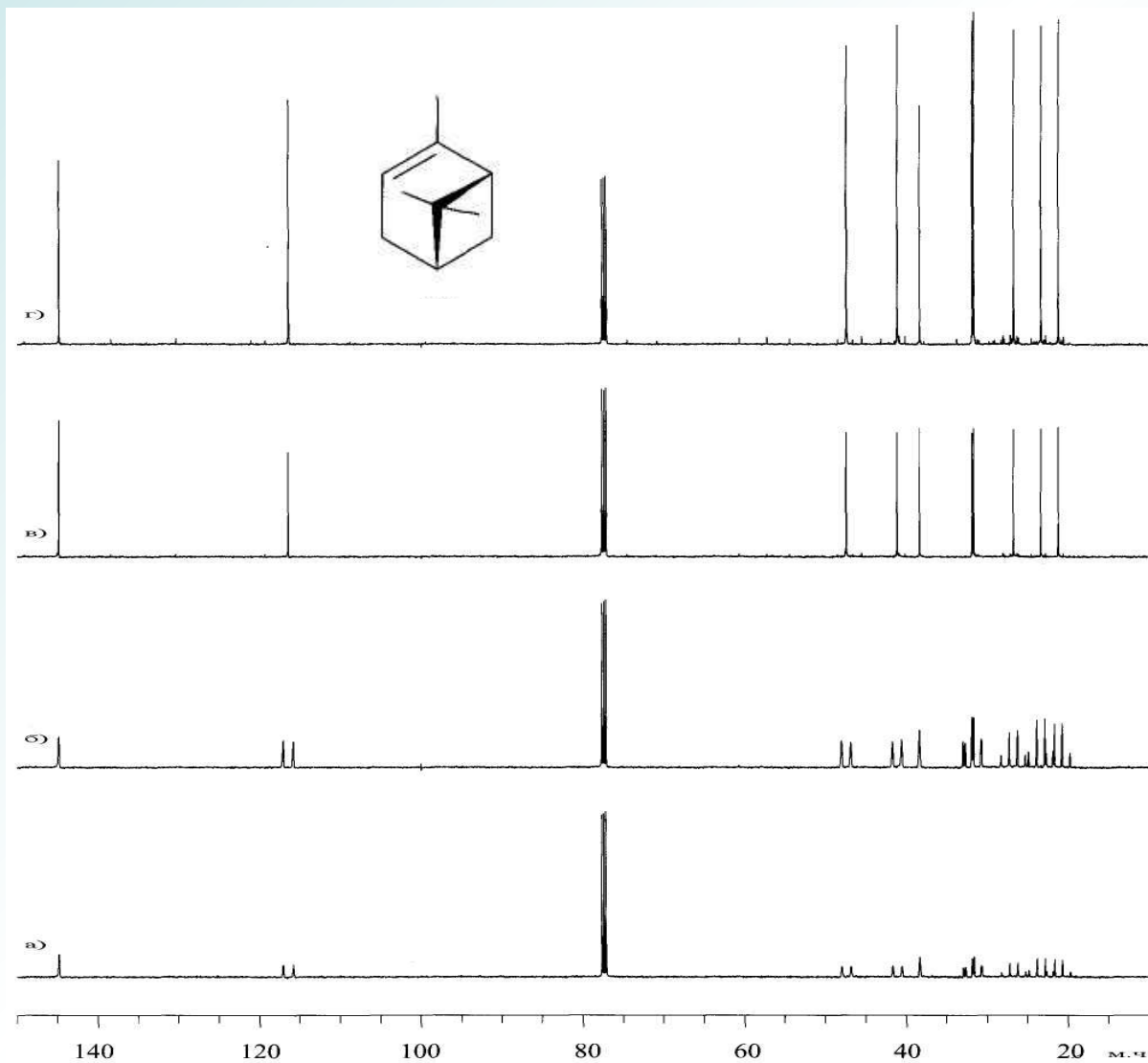


## ЗАСТОСУВАННЯ ЯЕО – ПІДВИЩЕННЯ ЧУТЛИВОСТІ ЯМР МАЛОЧУТЛИВИХ ЯДЕР



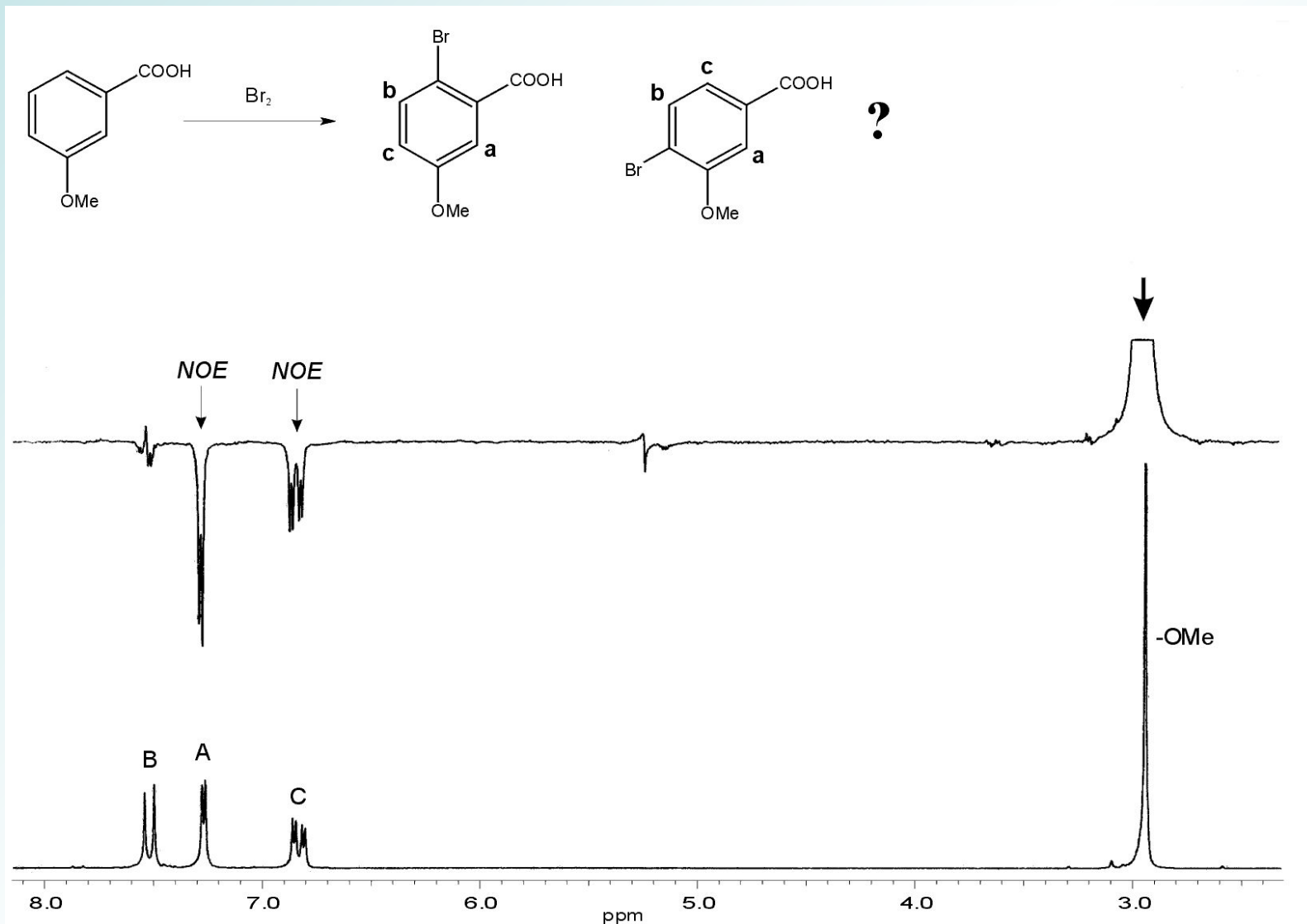


# ПРИКЛАДИ СПЕКТРІВ $^{13}\text{C}$ -ЯМР, ЗНЯТИХ У РІЗНИХ УМОВАХ



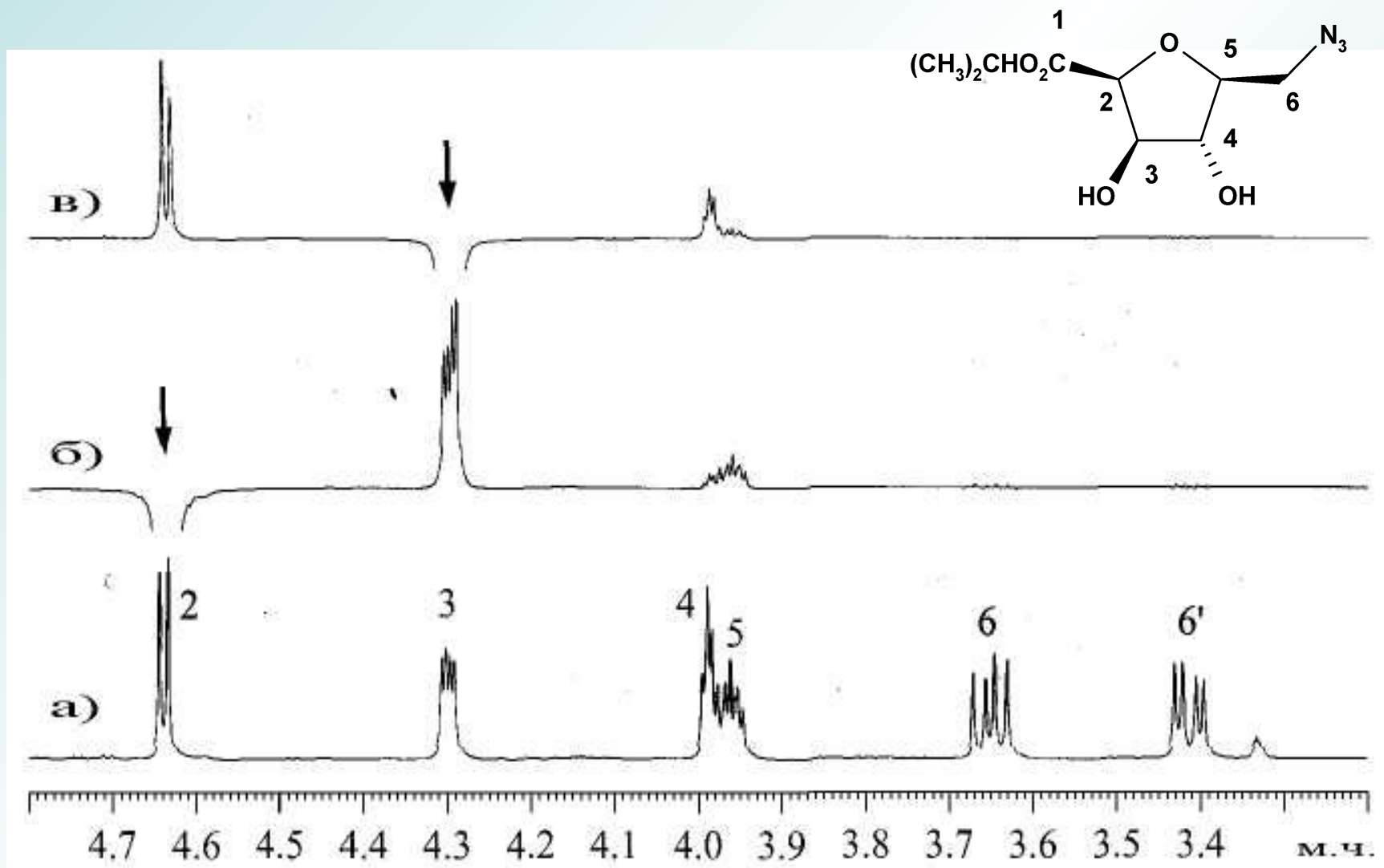


# ЗАСТОСУВАННЯ ЯЕО – ВИЗНАЧЕННЯ ПРОСТОРОВОЇ БУДОВИ ХІМІЧНИХ СПОЛУК



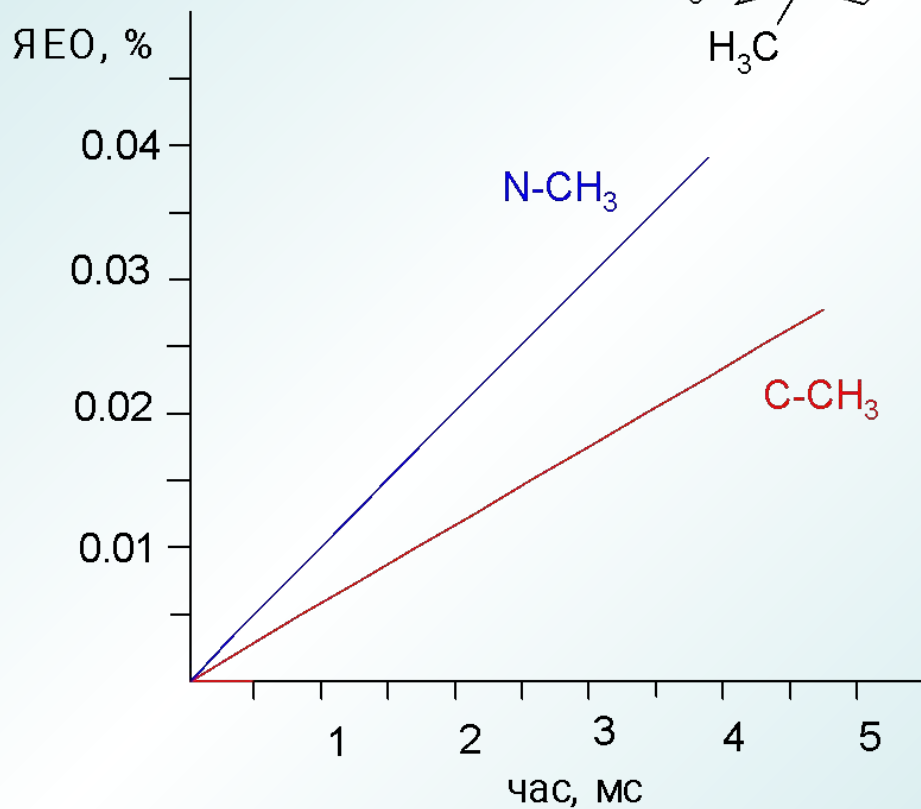
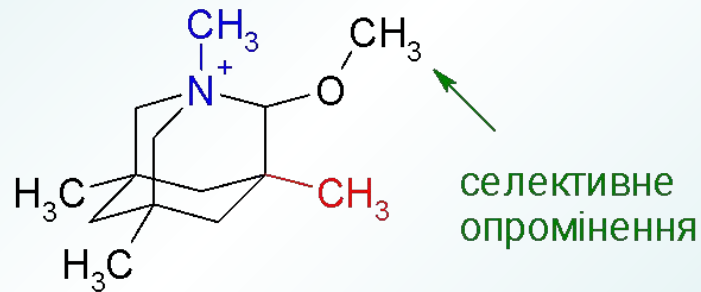


# ЗАСТОСУВАННЯ ЯЕО – ВИЗНАЧЕННЯ ПРОСТОРОВОЇ БУДОВИ ХІМІЧНИХ СПОЛУК





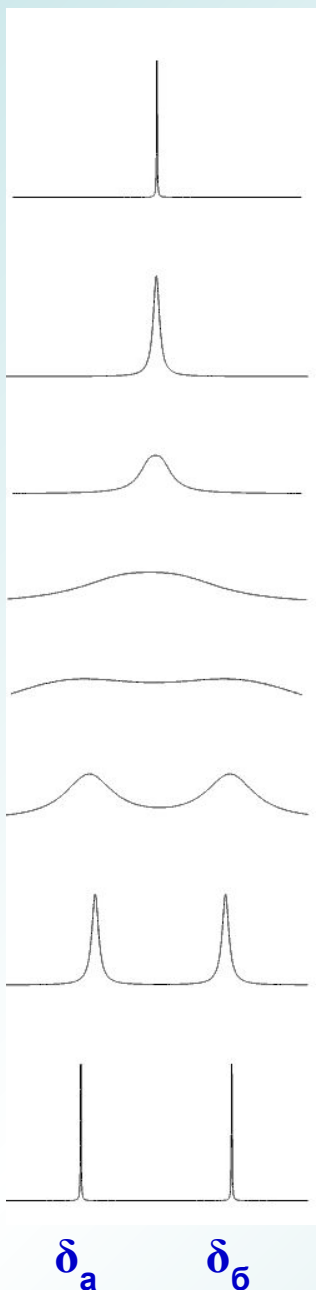
# ДИНАМІЧНИЙ ЯЕО





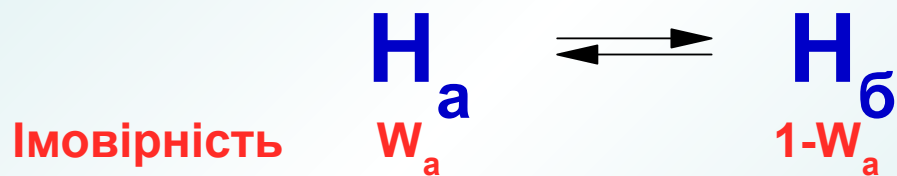
## ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ В ЯМР

ШВИДКО



повільно

$\delta_a$        $\delta_b$



Хімічний зсув  $\delta_a W_a + \delta_b (1 - W_a)$

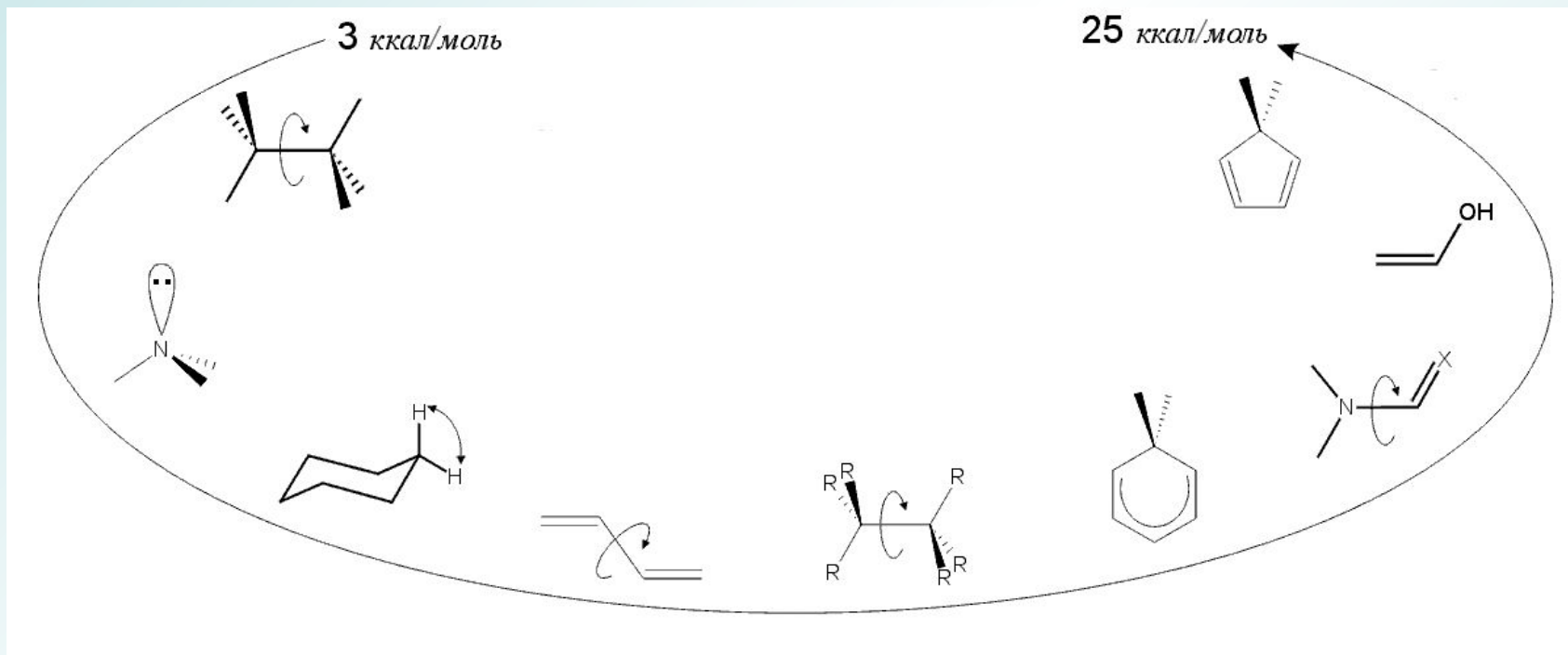
Коалесценція  $K = \pi \Delta \nu / \sqrt{2}$

Інтенсивність  $W_a / (1 - W_a)$



# ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ В ЯМР - ПРИКЛАДИ

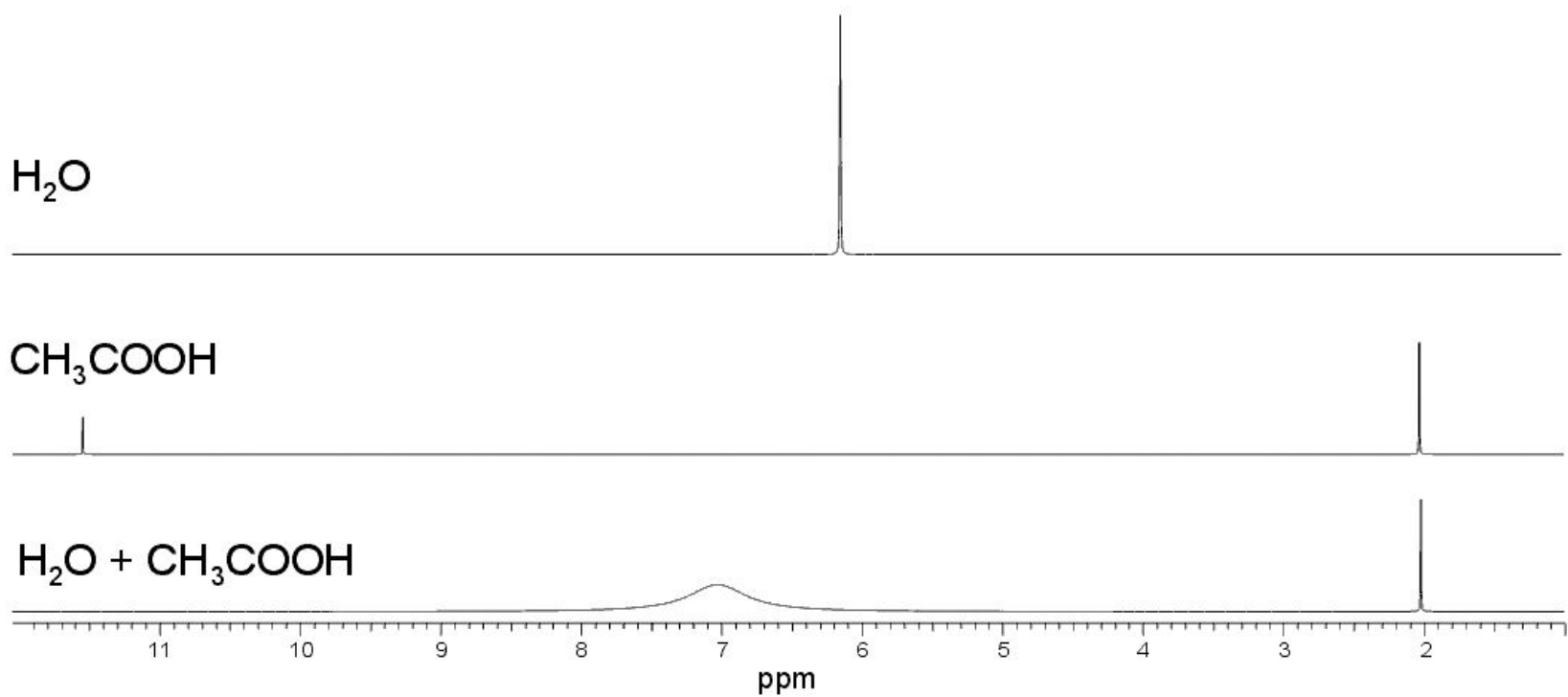
Характеристичний час ЯМР ~1 мс







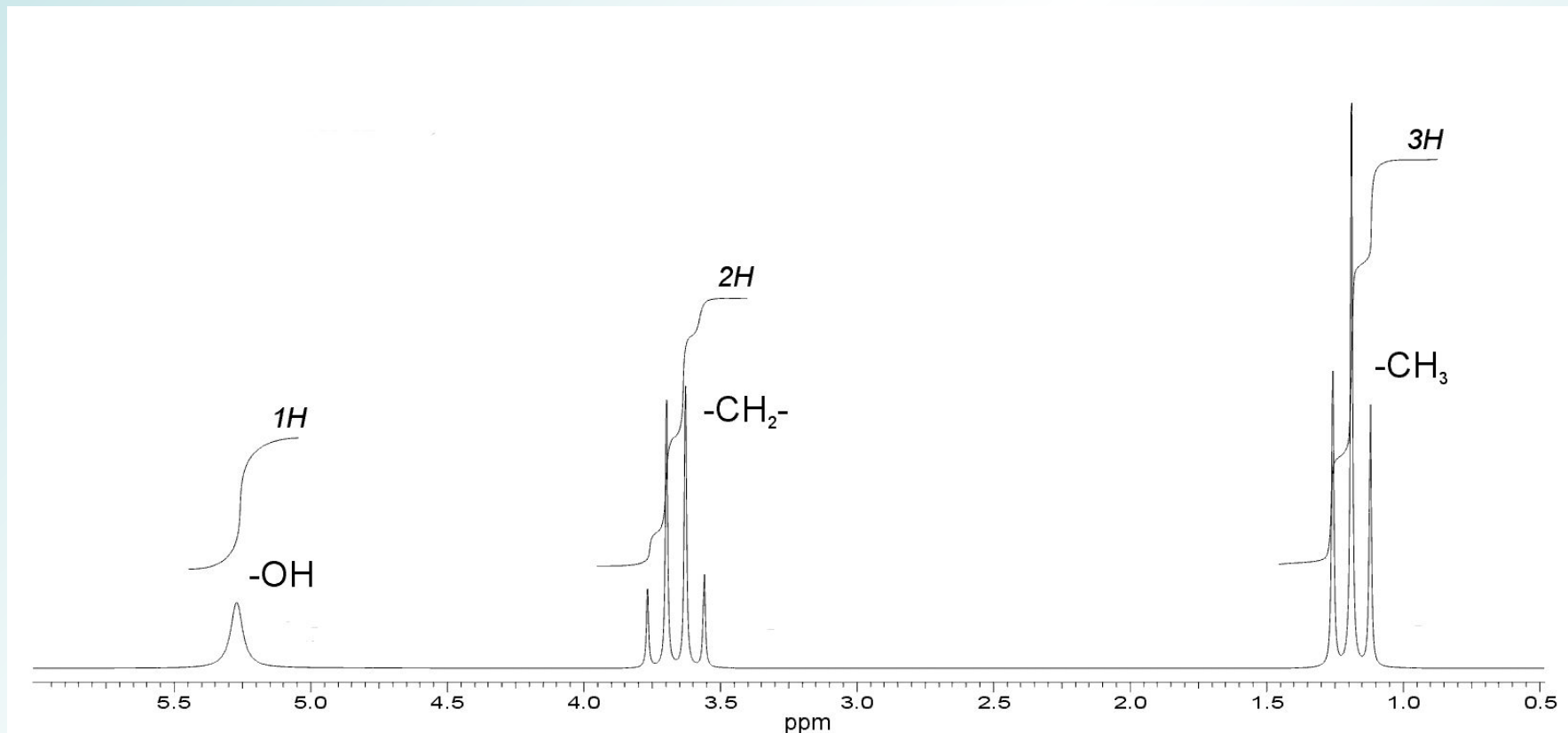
# ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ В ЯМР - ПРИКЛАДИ





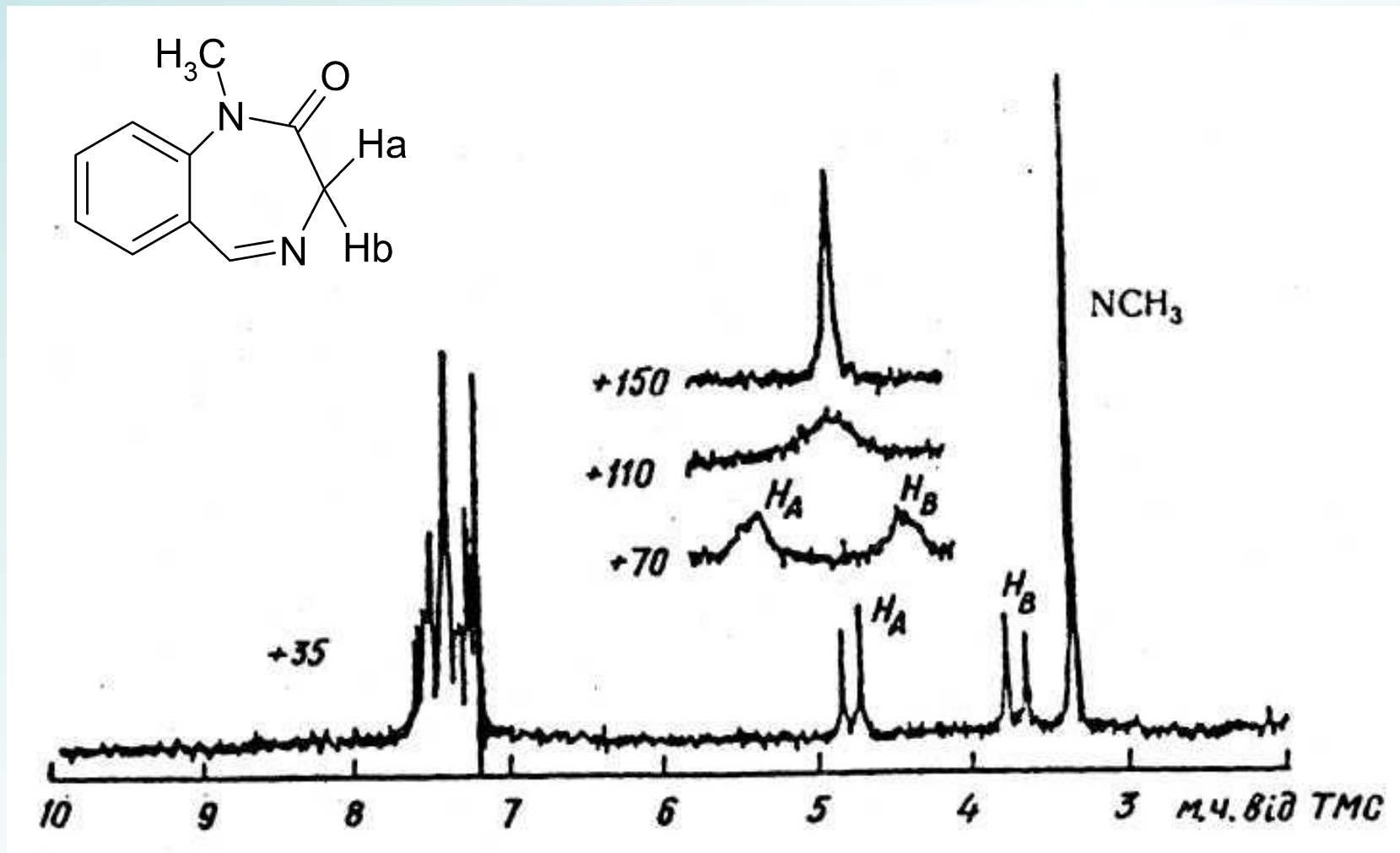
# ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ В ЯМР - ПРИКЛАДИ

## спектр $^1\text{H}$ -ЯМР етанолу в дейтерохлороформі



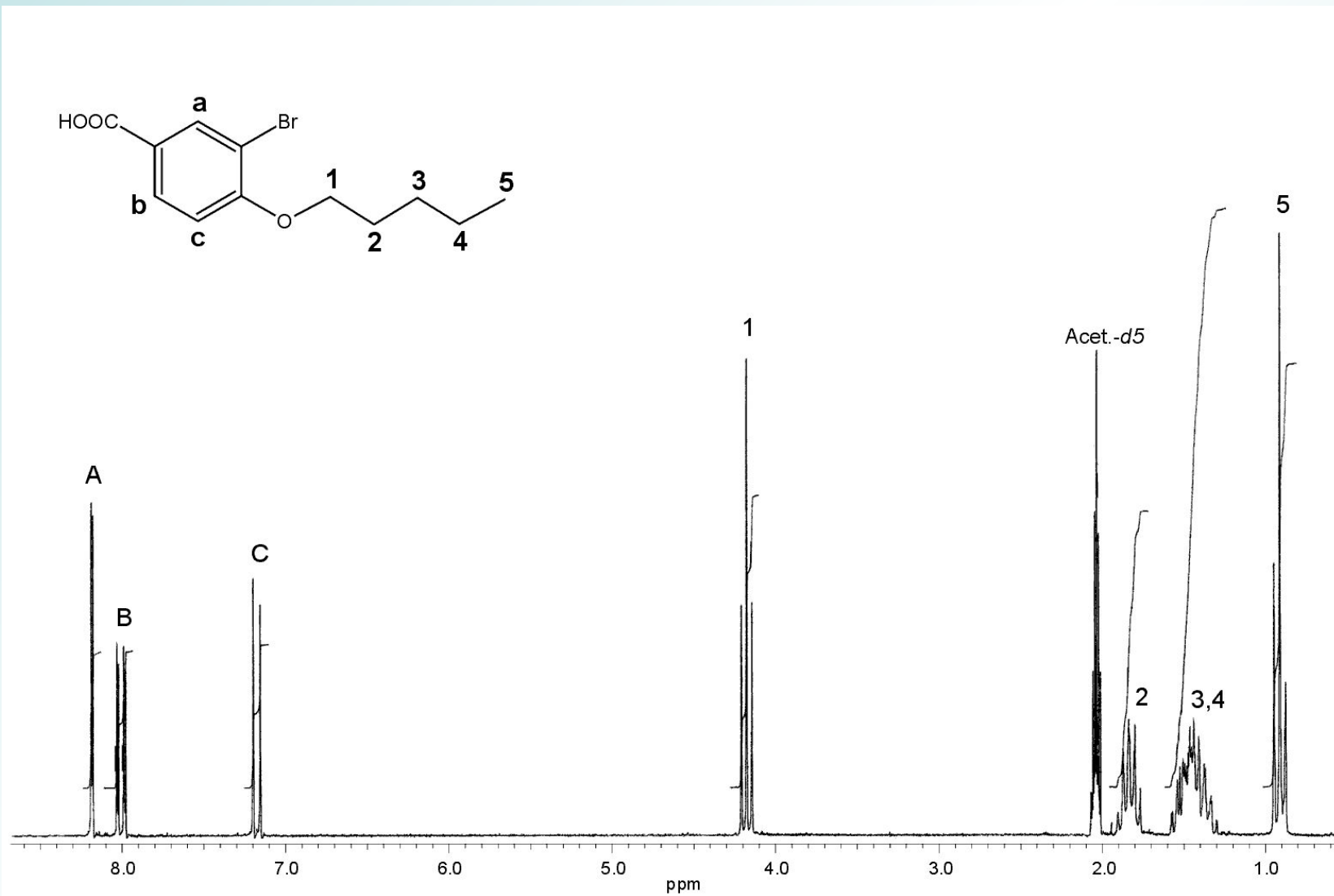


## ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ В ЯМР - ПРИКЛАДИ





## ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ В ЯМР - ПРИКЛАДИ





# ДИНАМІЧНІ ЕФЕКТИ В ЯМР - ПРИКЛАДИ

