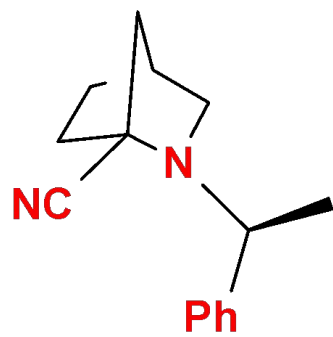


СТРАТЕГІЇ ДОСЛІДЖЕННЯ ХІМІЧНИХ СПОЛУК З ВИКОРИСТАННЯМ СУЧАСНИХ ФІЗИЧНИХ МЕТОДІВ

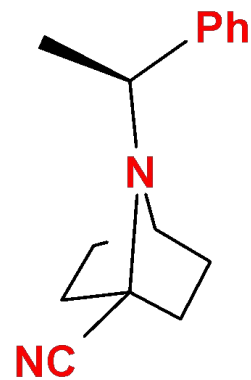
Частина друга

- ЯКИЙ СКЛАД (БРУТТО-ФОРМУЛУ) МАЄ СПОЛУКА?
- ЯКІ ФУНКЦІОНАЛЬНІ ГРУПИ (СТРУКТУРНІ ФРАГМЕНТИ) МАЄ МОЛЕКУЛА?
- ЯКОЮ Є МОЛЕКУЛЯРНА ТОПОЛОГІЯ (ПОСЛІДОВНІСТЬ ХІМІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ)?
- ЯКОЮ Є ПРОСТОРОВА БУДОВА МОЛЕКУЛ СПОЛУКИ, ЩО ДОСЛІДЖУЄТЬСЯ?
- ДЕТАЛІ БУДОВИ: ЧИ НАЯВНІ В МОЛЕКУЛІ ВОДНЕВІ ЗВ'ЯЗКИ, В ЯКІЙ ТАУТОМЕРНІЙ ФОРМІ ІСНУЄ СПОЛУКА І Т.П.?

ПРИКЛАД 2
(^1H -, ^{13}C -ЯМР, DEPT)

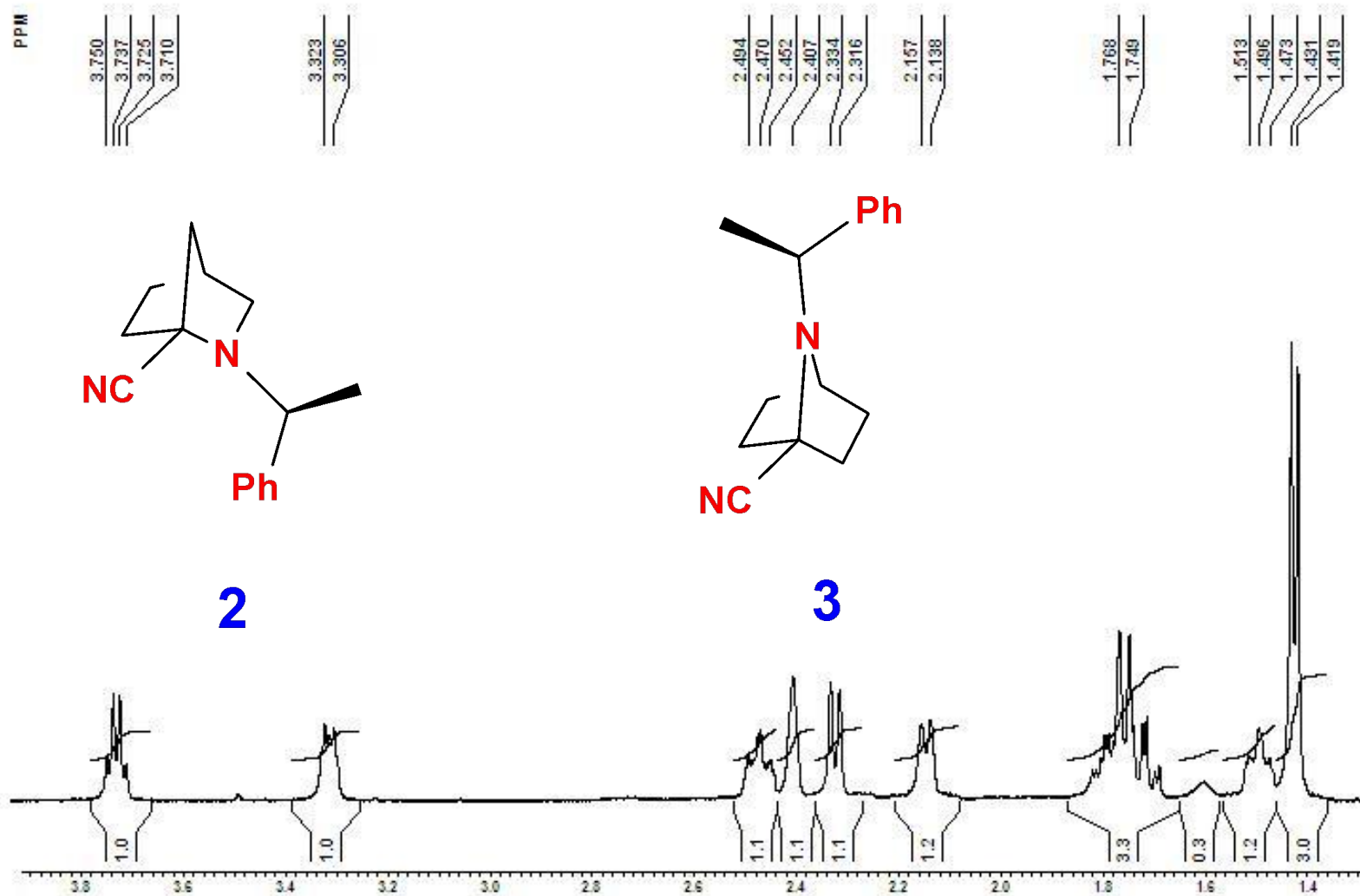


2

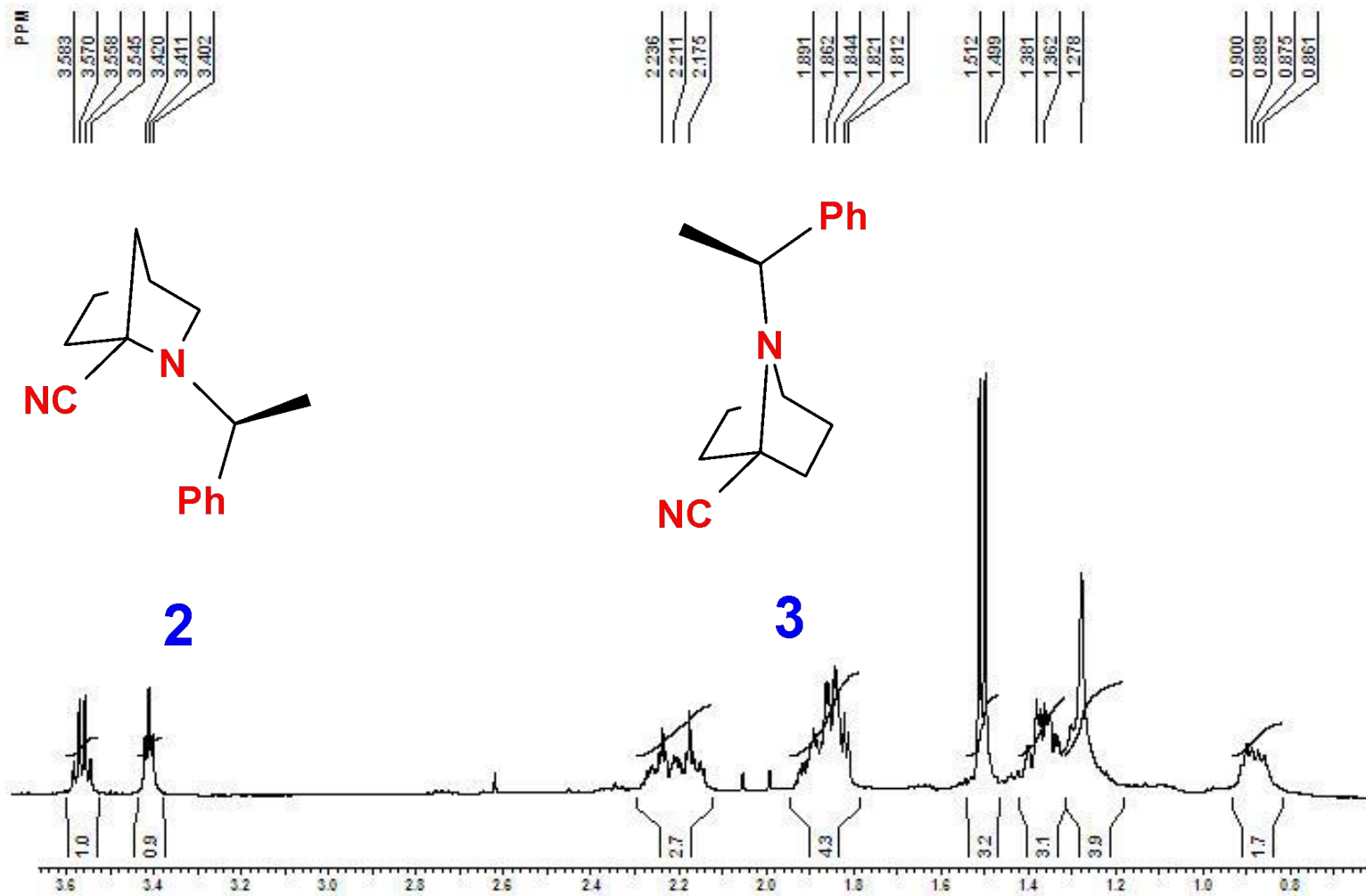


3

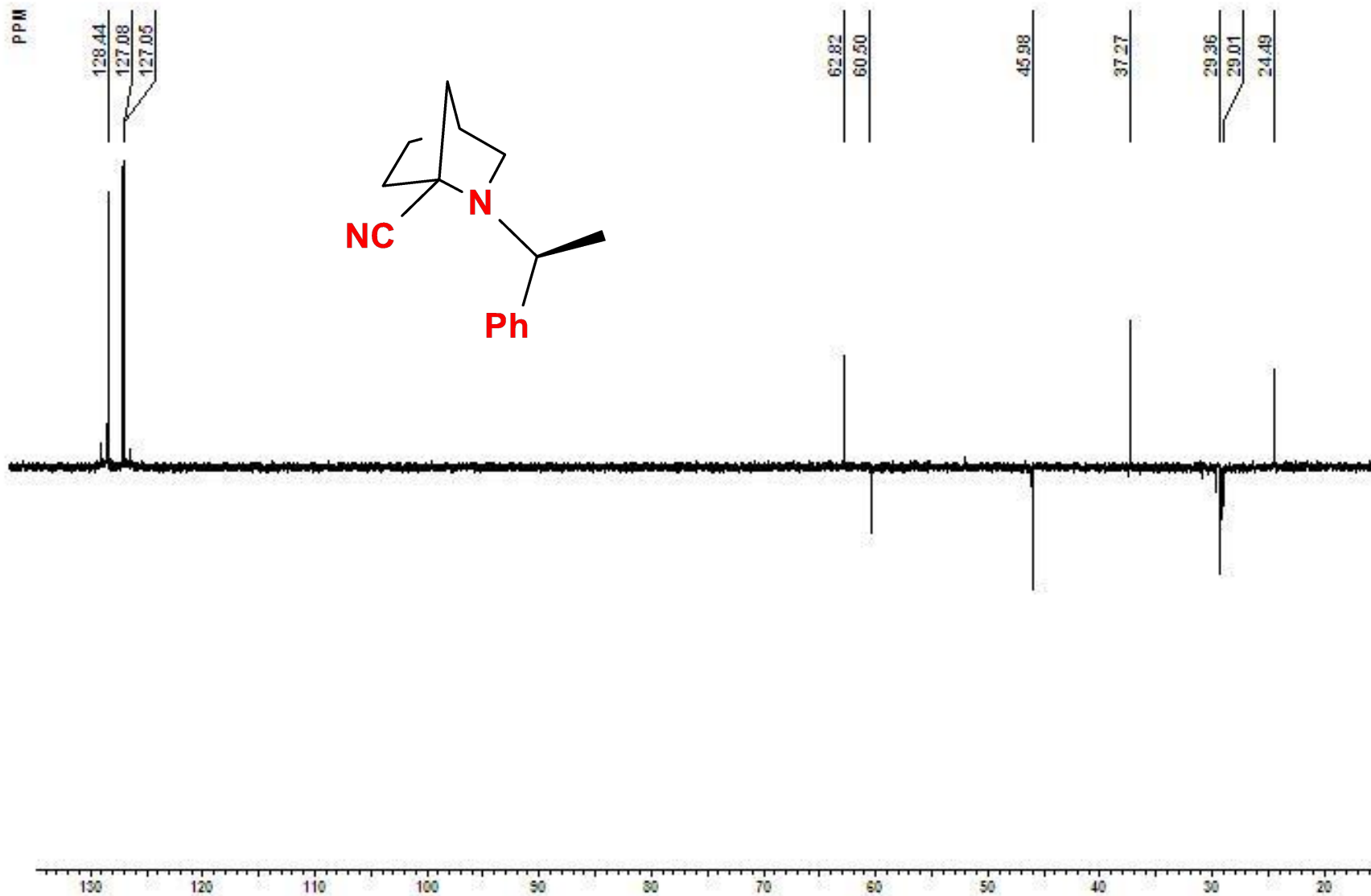
ПРИКЛАД 2 (¹H-ЯМР сполуки 2)



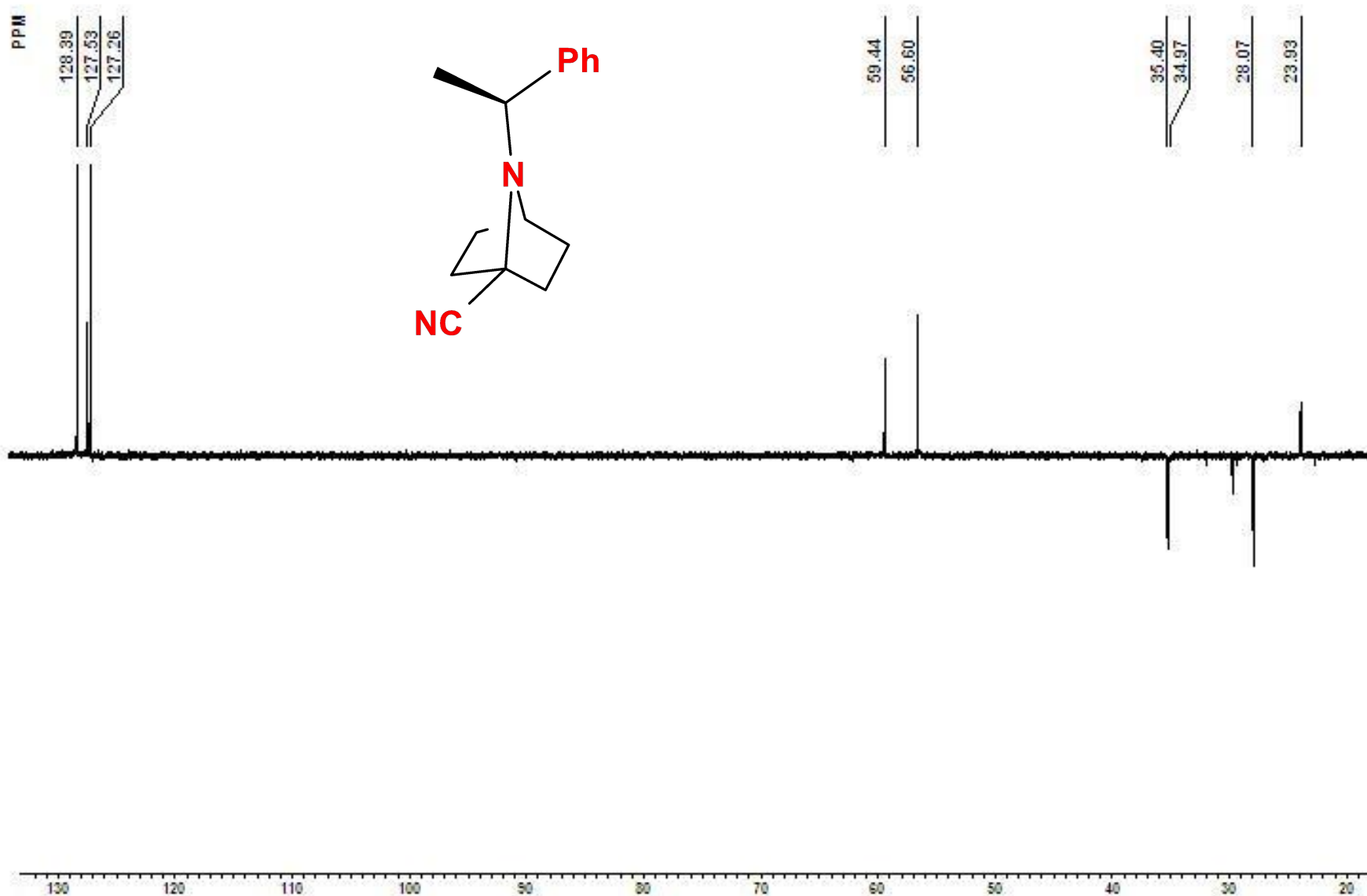
ПРИКЛАД 2 (¹H-ЯМР сполуки 3)



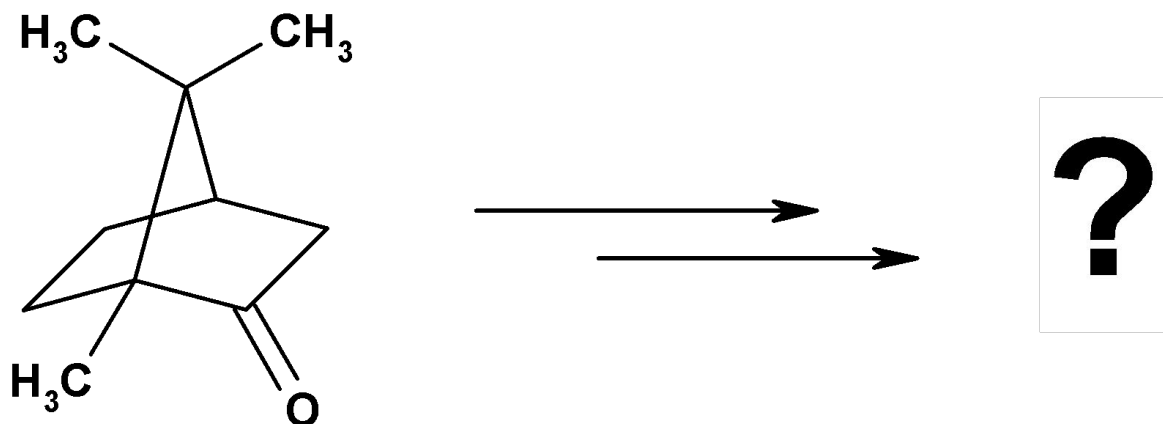
ПРИКЛАД 2 (DEPT сполуки 2)



ПРИКЛАД 2 (DEPT сполуки 3)

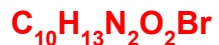


ПРИКЛАД 1
(¹H-, ¹³C-ЯМР, HSQC, COSY, HMBC, NOESY)



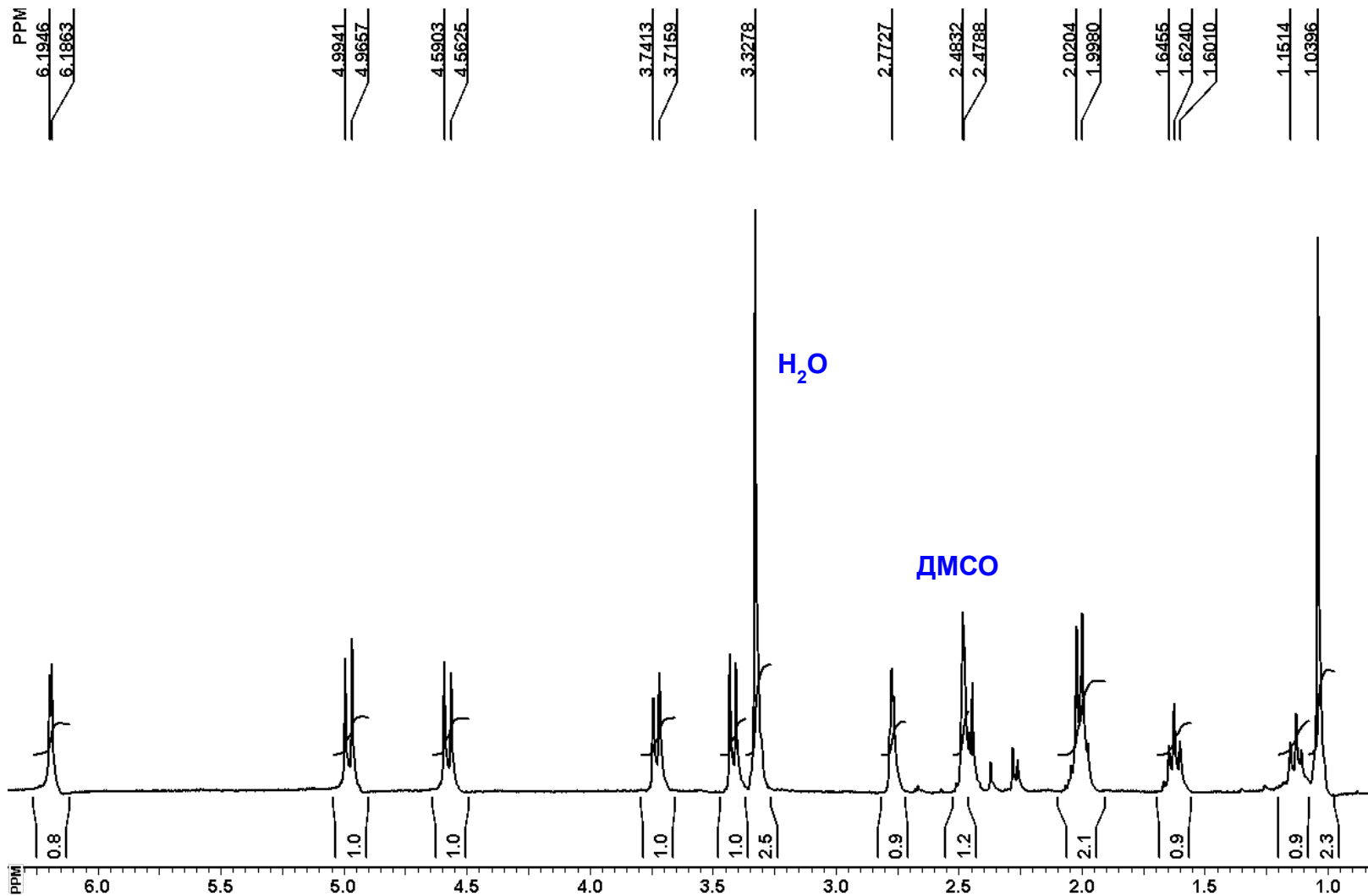
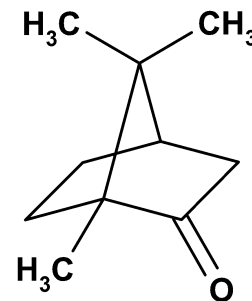
**Склад невідомої сполуки (мас-
спектрометрія високої роздільної
здатності):**





1H -ЯМР спектр сполуки (розчинник – $(CD_3)_2SO$)

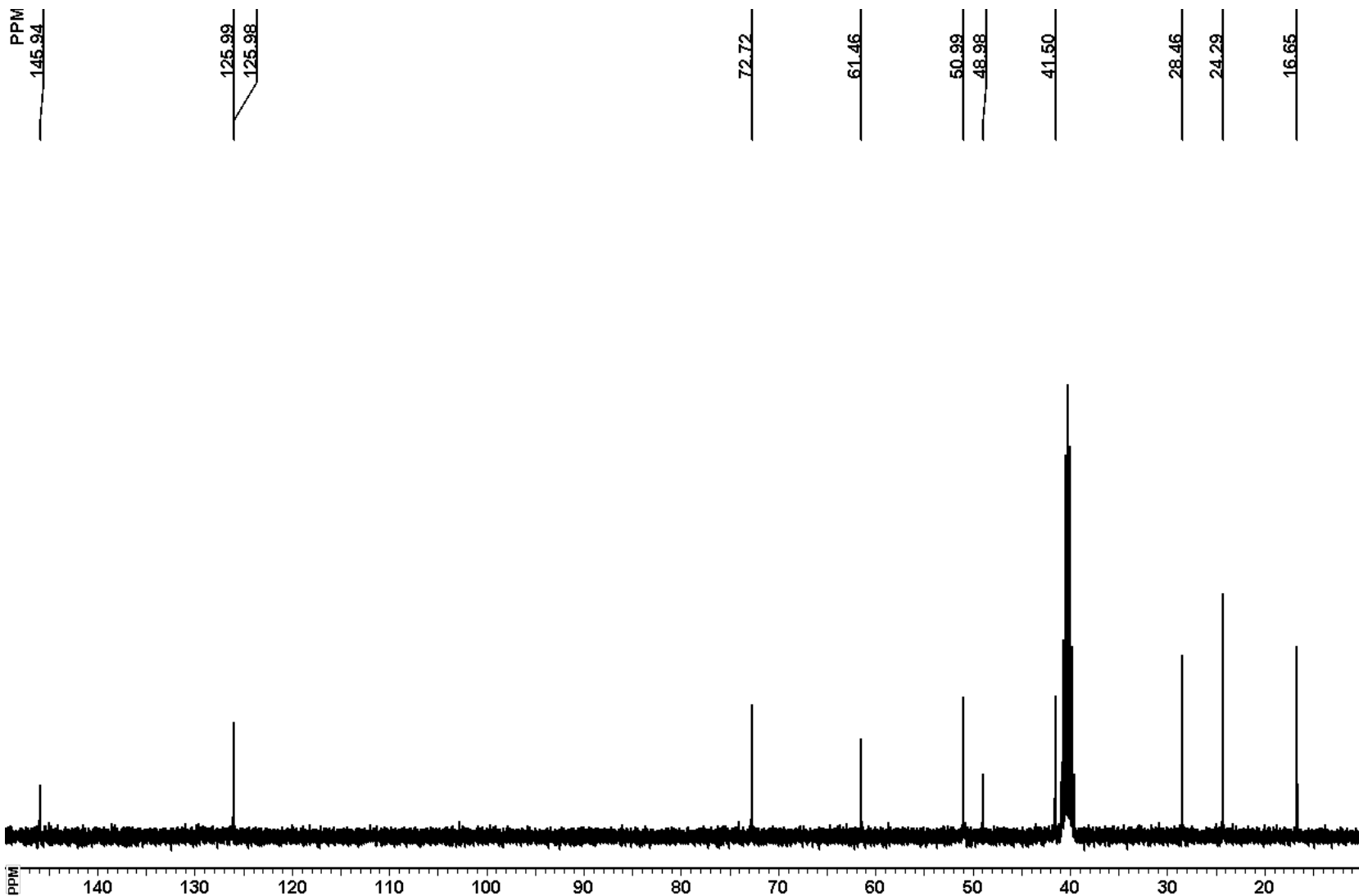
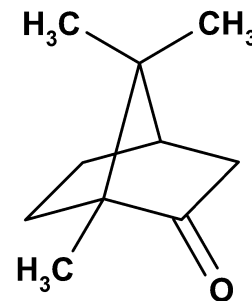
Аналіз хімічних зсувів, інтегральної інтенсивності та мультиплетності. Висновки: наявна лише одна група CH_3 ; всі інші сигнали – CH або CH_2 групи. Імовірна наявність $C=CH$ -фрагменту. CH або CH_2 групи можуть бути зв'язані з гетероатомами

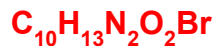


$C_{10}H_{13}N_2O_2Br$

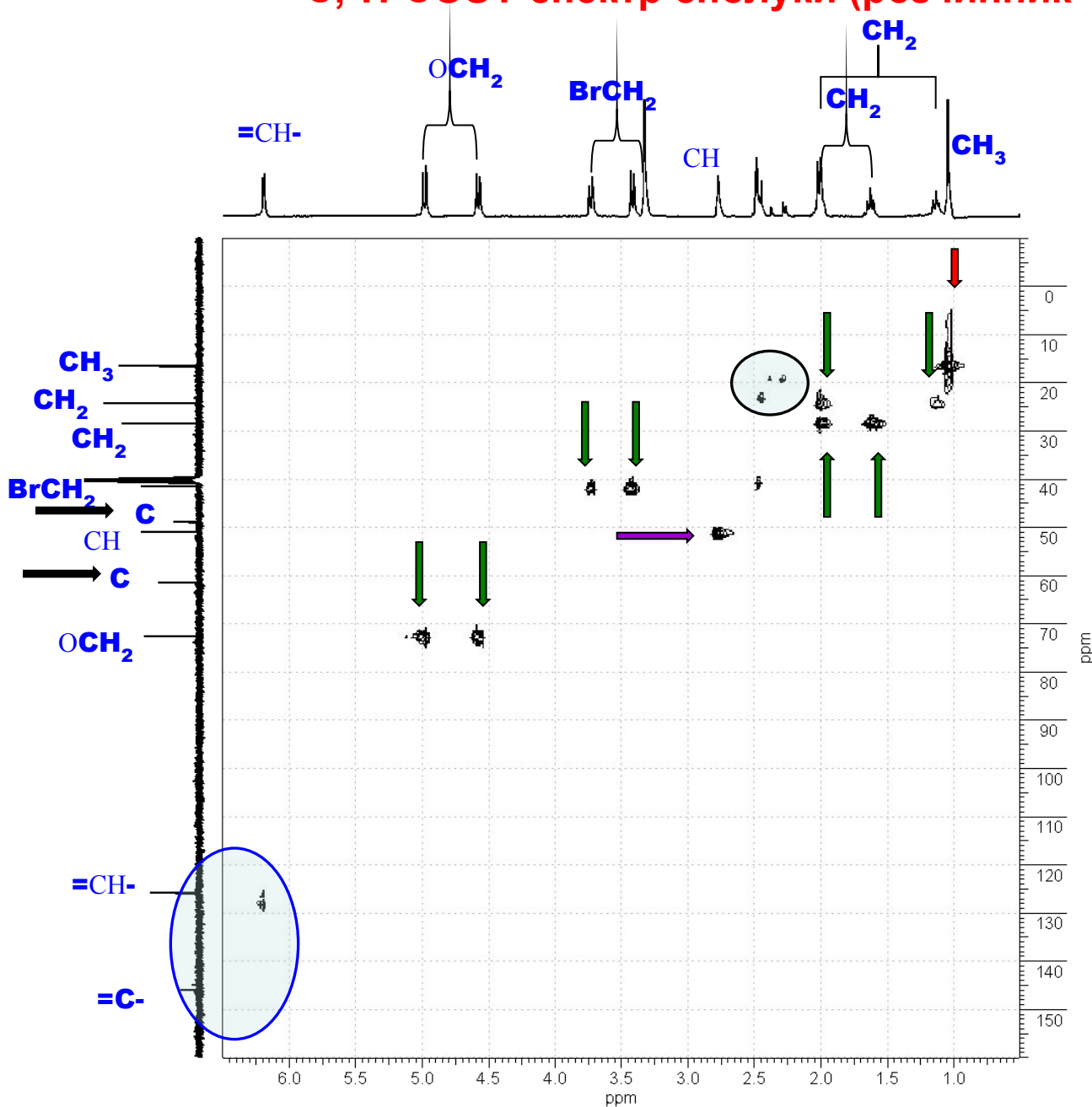
^{13}C -ЯМР спектр сполуки (розчинник – $(CD_3)_2SO$)

Аналіз хімічних зсувів. Висновки: атоми вуглецю з вихідної сполуки, напевно, збереглися; всі вони нееквівалентні. Імовірна наявність $C=CH$ -фрагменту. CH або CH_2 групи можуть бути зв'язані з гетероатомами.





$^{13}C, ^1H$ -COSY спектр сполуки (розчинник – $(CD_3)_2SO$)



Висновки.
в сполуці наявні:

1 CH_3 група

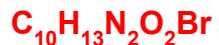
4 CH_2 групи, дві з яких зв'язані з гетероатомами (киснем та азотом/бромом)

1 CH група

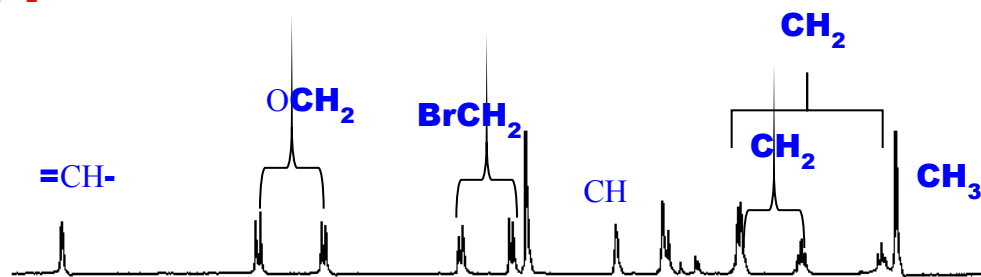
Фрагмент $C=CH$

Домішки?

Відповідно до брутто-формули, в молекулі є два четвертинних атоми C



COSY спектр сполуки (розчинник – $(CD_3)_2SO$)



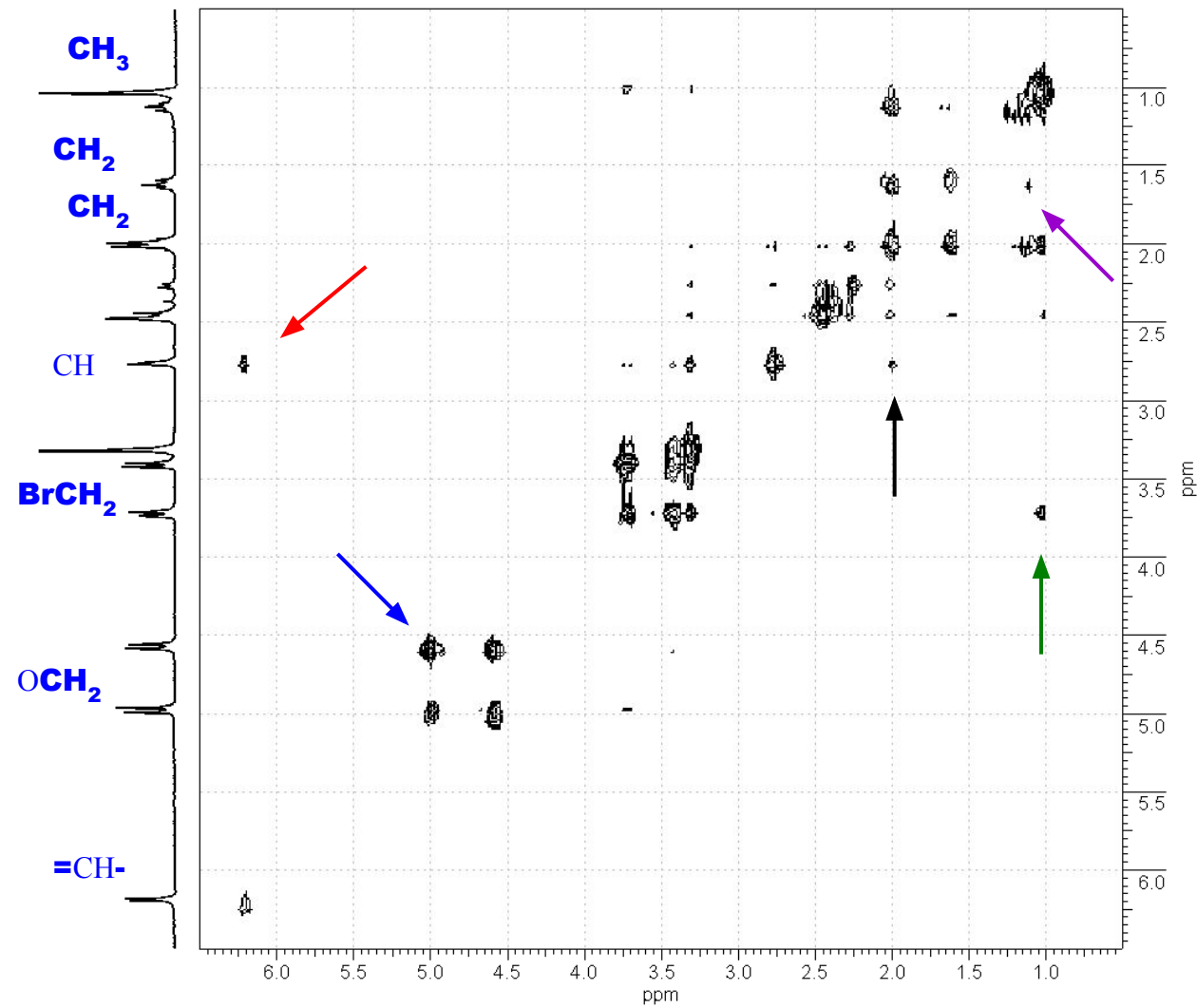
C=CH- фрагмент і **CH** група зв'язані між собою

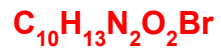
OCH₂ – ізолювана, а значить, зв'язана з четвертинним **C**

BrCH₂ група, імовірно, зв'язана з **CH₃** (через **C**?)

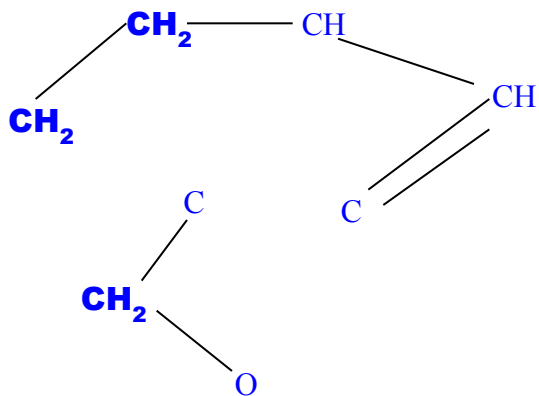
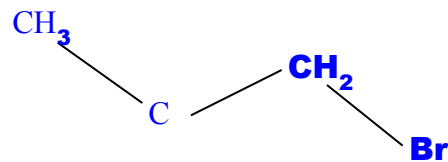
Аліфатичні **CH₂** зв'язані між собою

Одна з аліфатичних **CH₂** зв'язана з **CH**





PUZZLE!



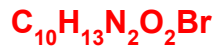
C=CH- фрагмент і CH група зв'язані між собою

OCH₂ та BrCH₂ – ізольовані, а значить, зв'язані з четвертинними C

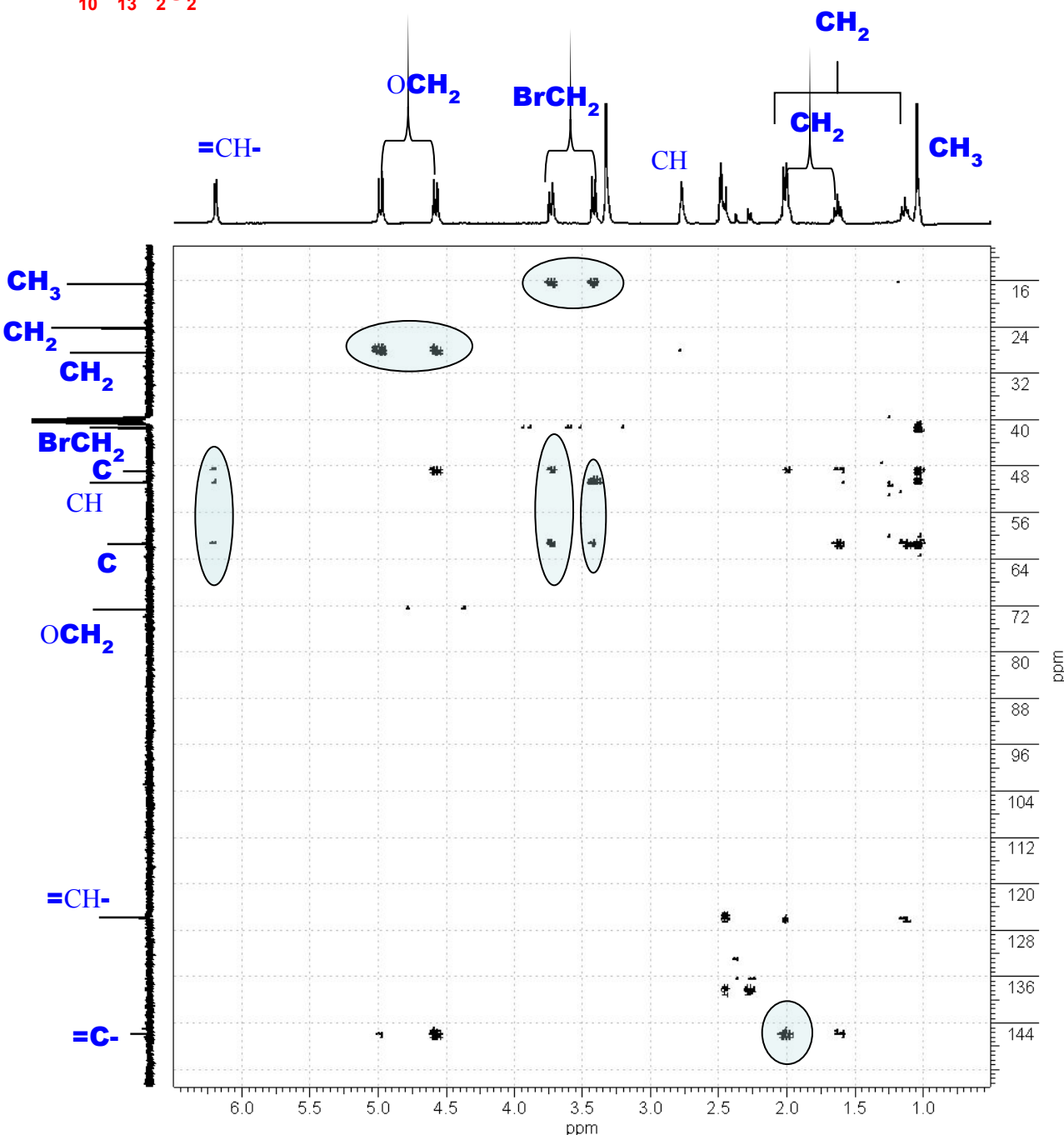
CH₃ група зв'язана з BrCH₂, імовірно, через C

Аліфатичні CH₂ зв'язані між собою

Одна з аліфатичних CH₂ зв'язана з CH



HMBC спектр сполуки (розчинник – $(CD_3)_2SO$)



=CH- фрагмент зв'язаний з CH і з C двома або більше зв'язками

OCH₂ □ □ CH₂

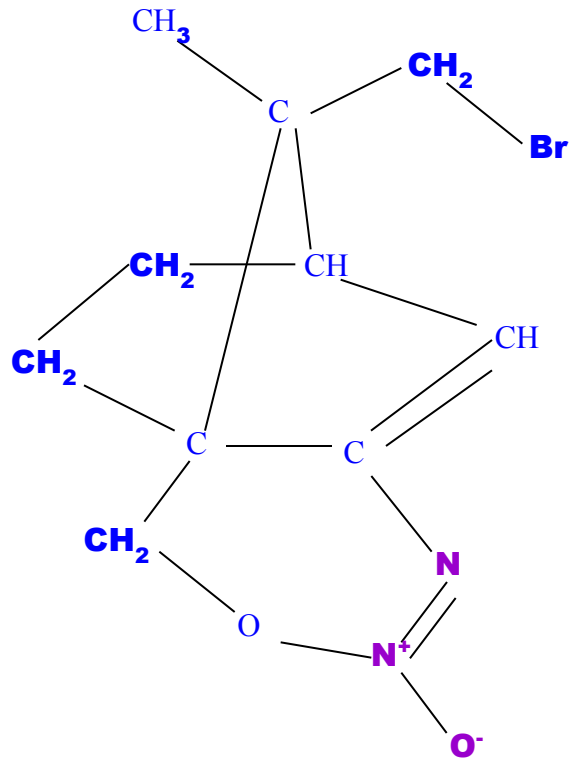
BrCH₂ □ □ CH₃

BrCH₂ □ □ C, C

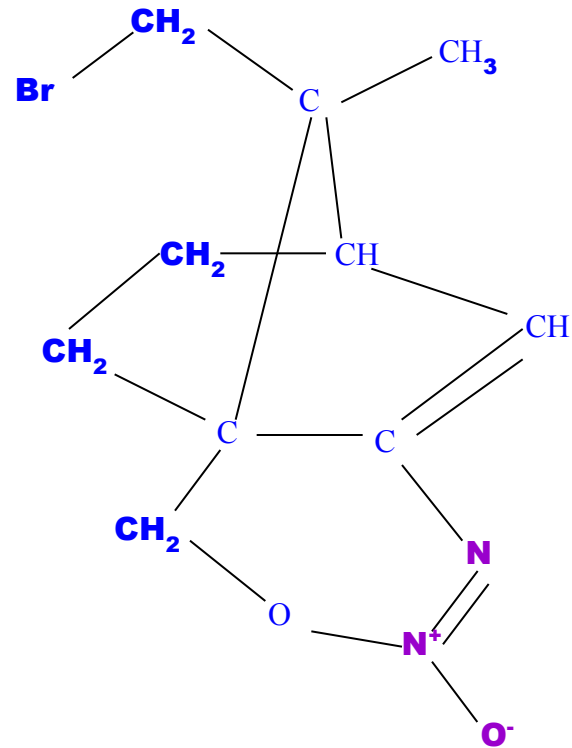
BrCH₂ □ □ CH

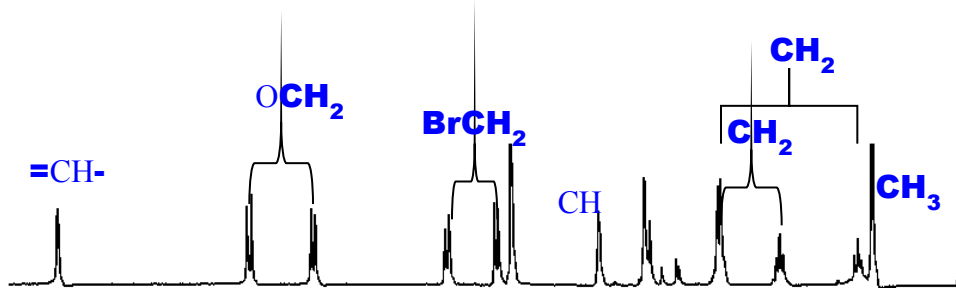
CH₂ □ □ =C-

Яка просторова будова сполуки?

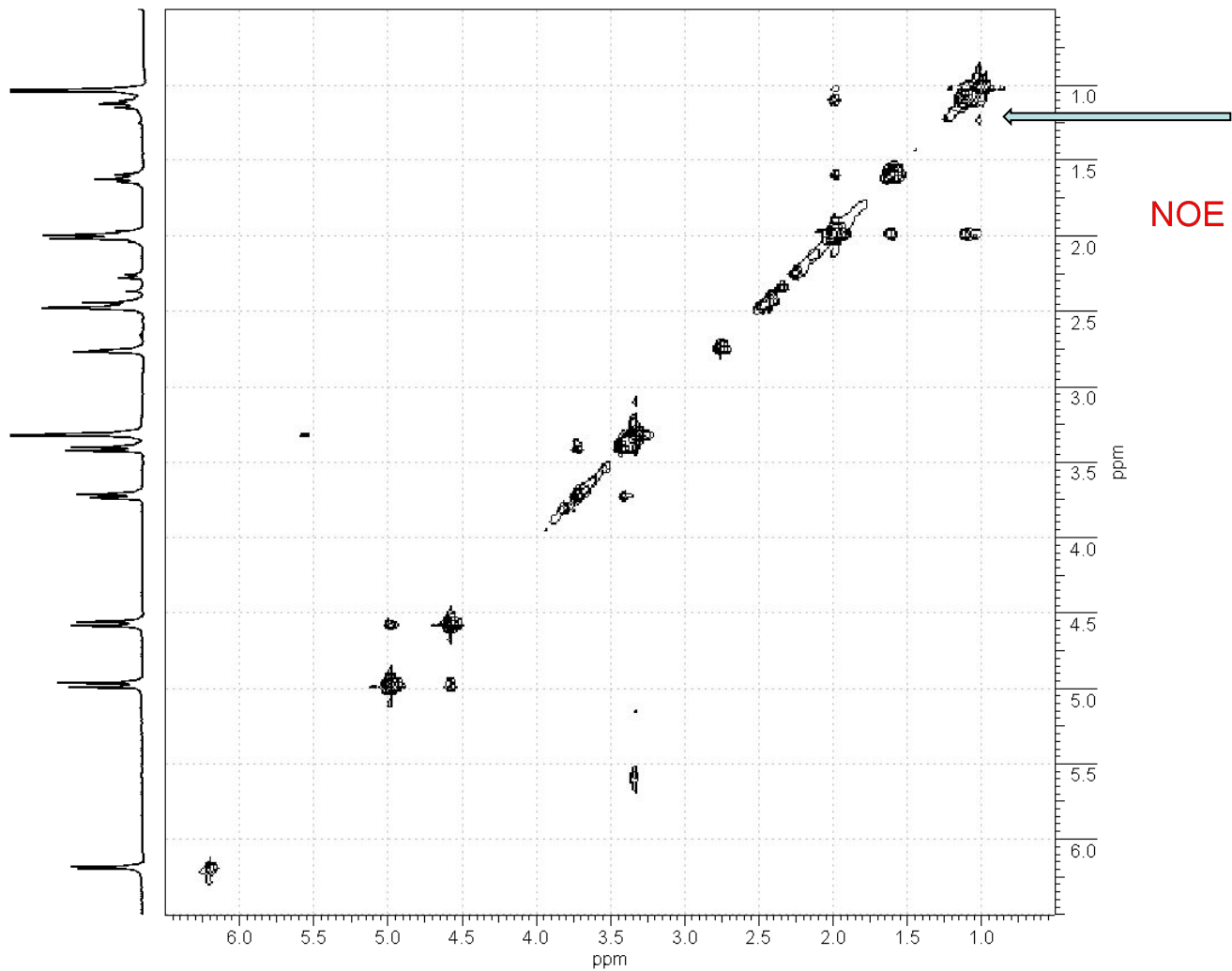


чи

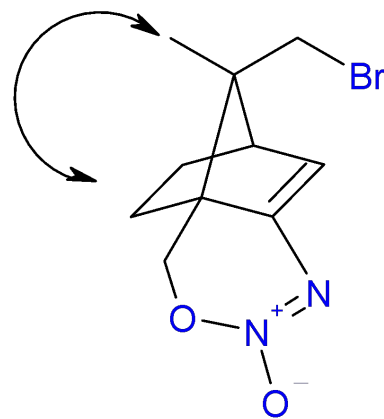




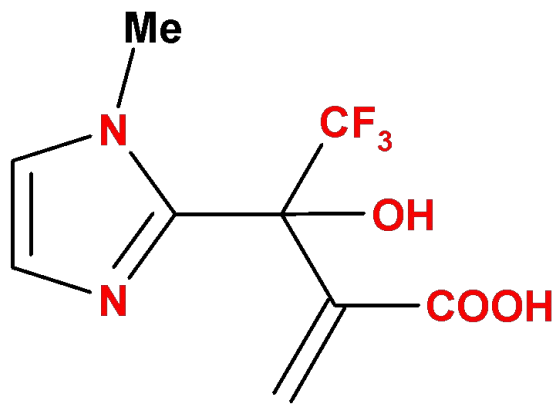
**NOESY спектр сполуки
(розчинник – $(\text{CD}_3)_2\text{SO}$)**



NOE

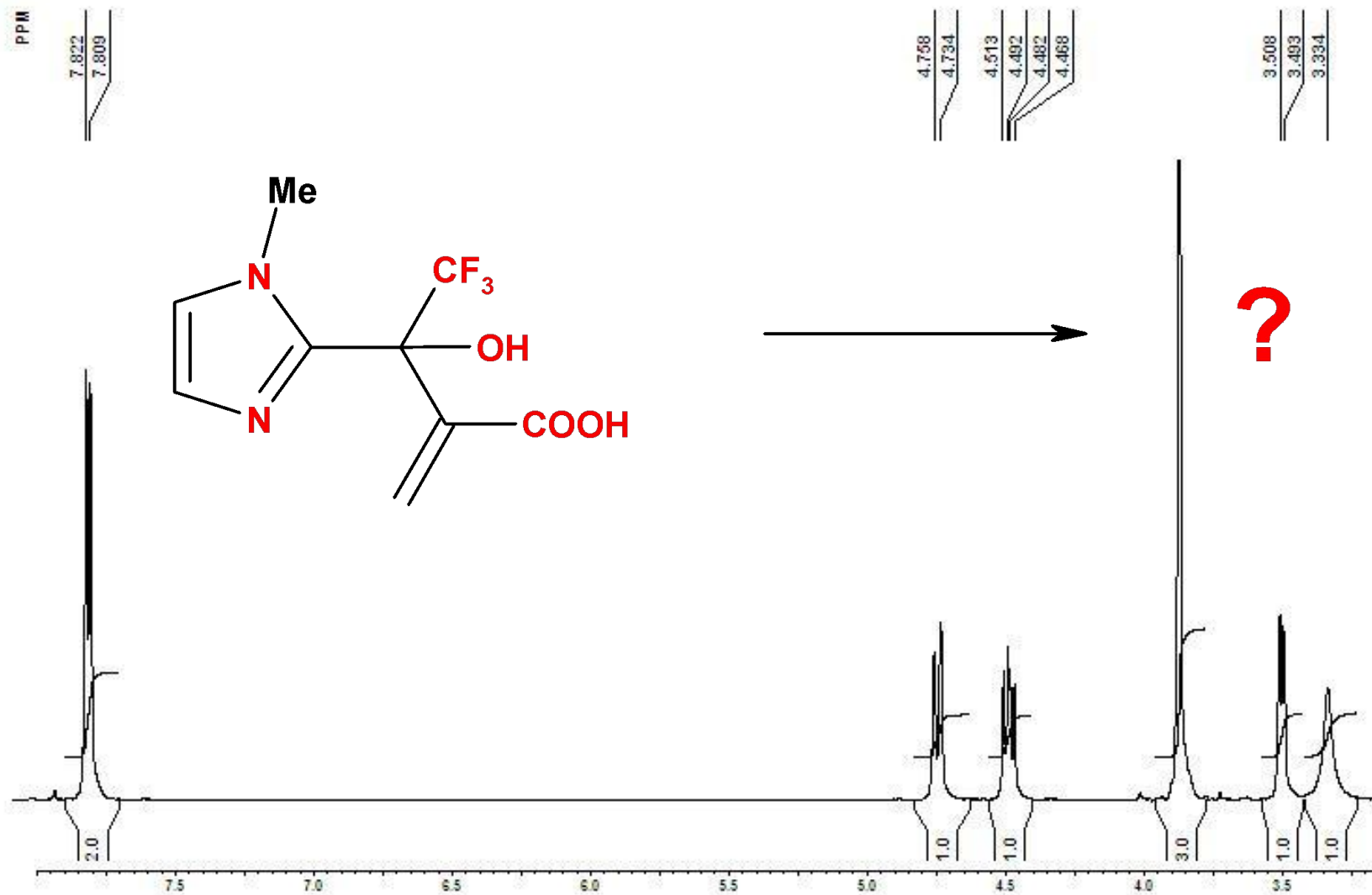


ПРИКЛАД 3
(^1H -, ^{13}C -ЯМР, DEPT, HSQC, HMBC, NOESY)



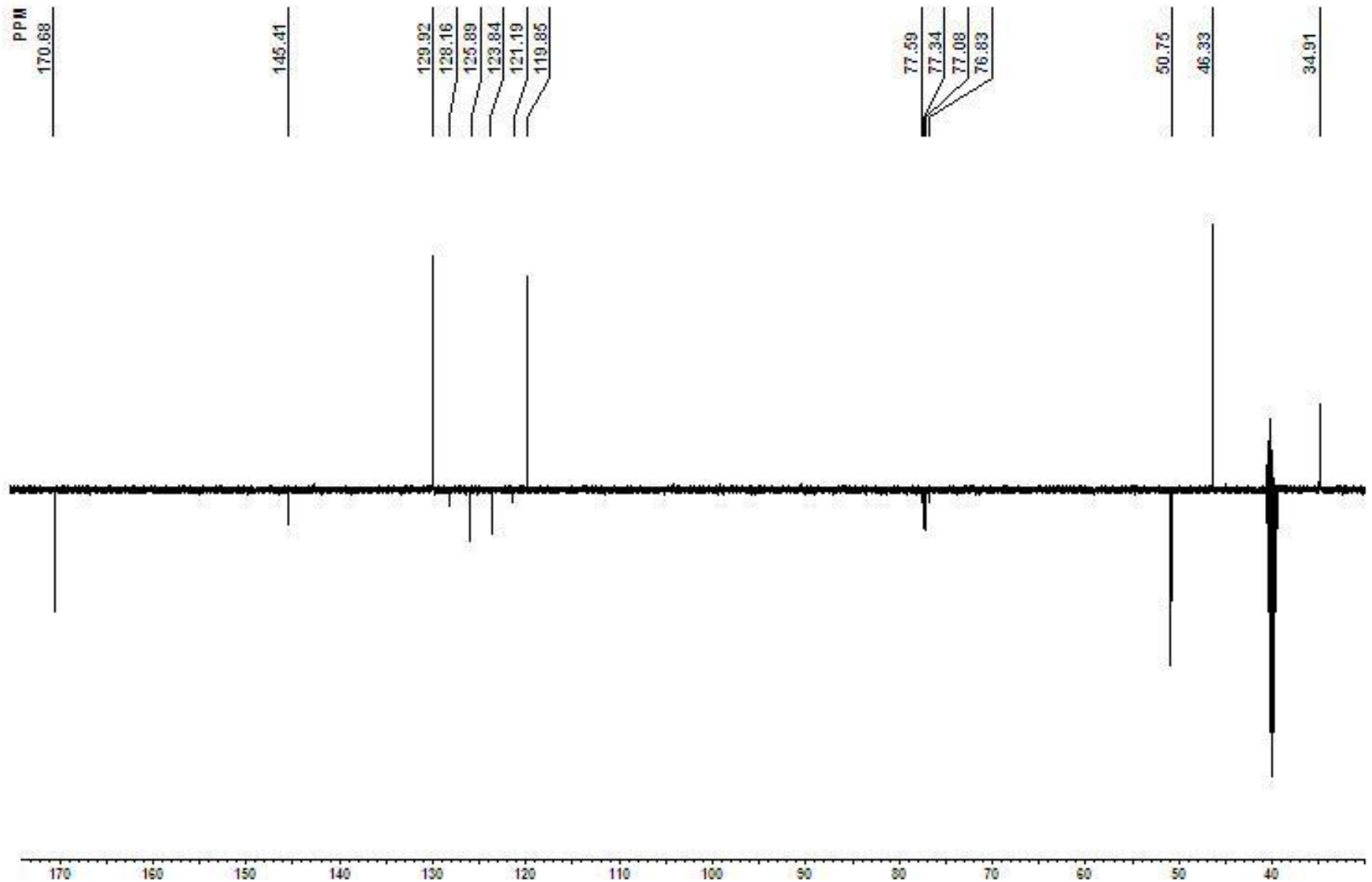
?

ПРИКЛАД 3 (¹H-ЯМР спектр невідомої сполуки)

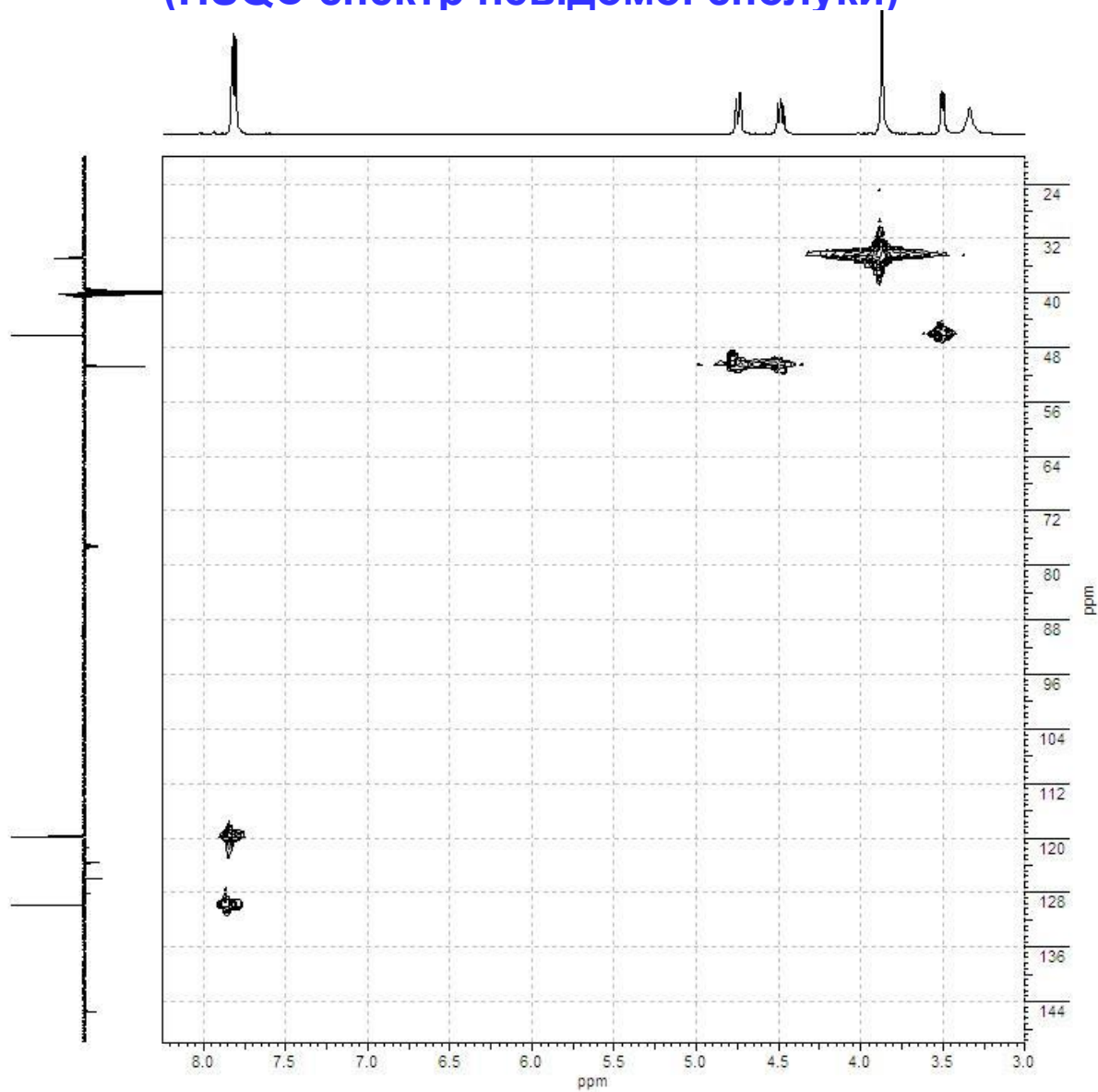


ПРИКЛАД 3

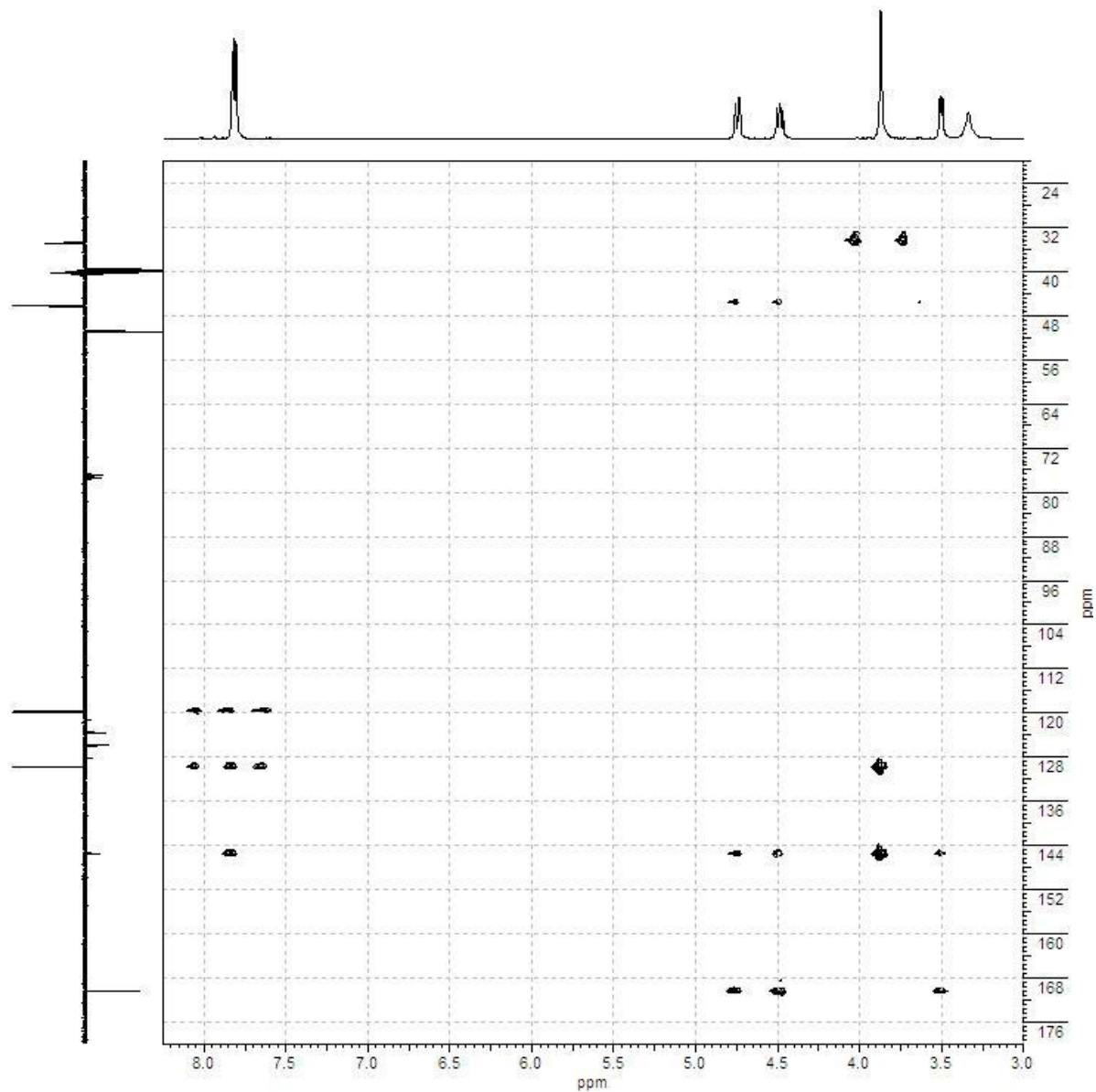
(^{13}C -ЯМР ІНЕРТ спектр невідомої сполуки)



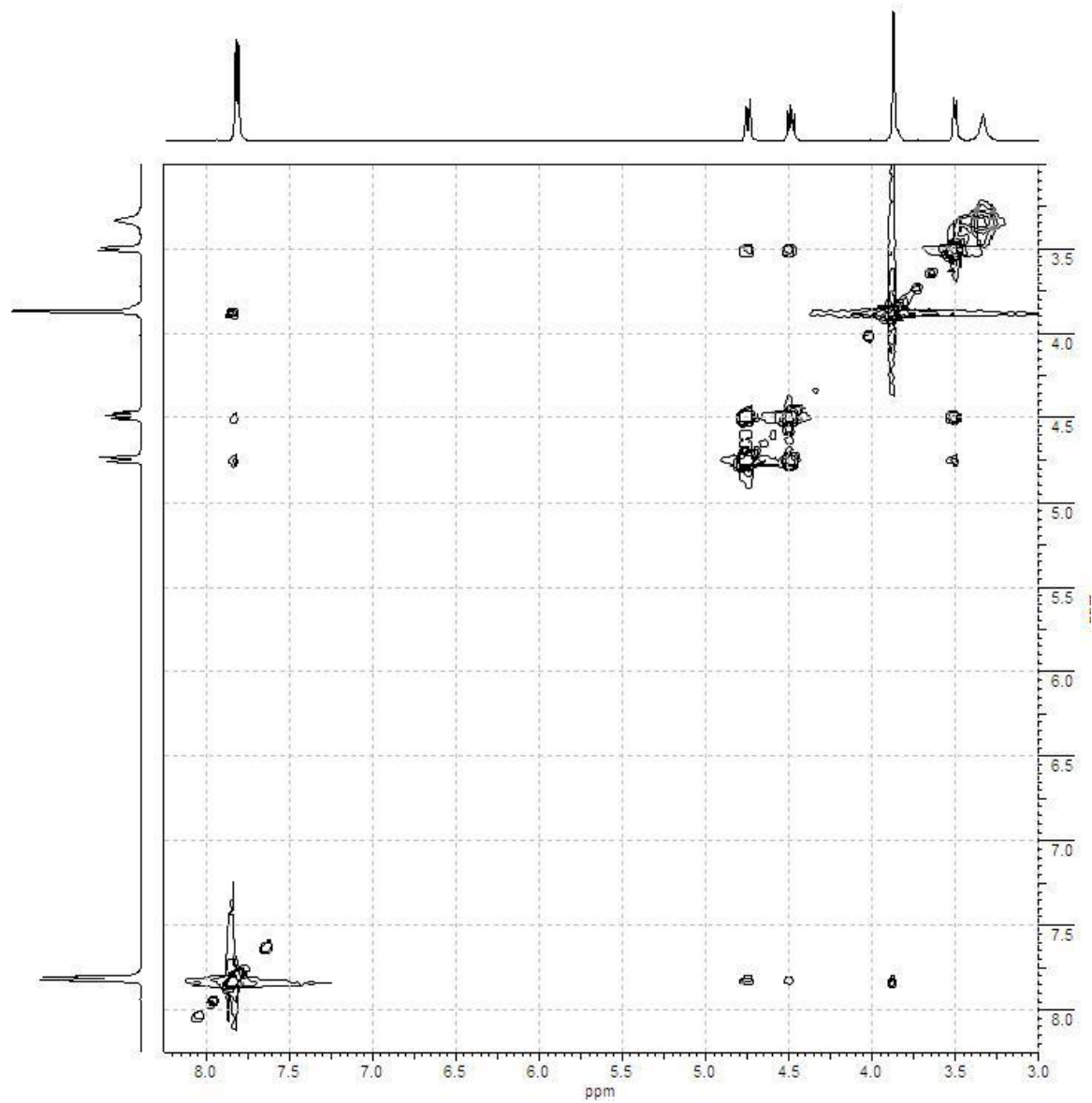
ПРИКЛАД 3 (HSQC спектр невідомої сполуки)



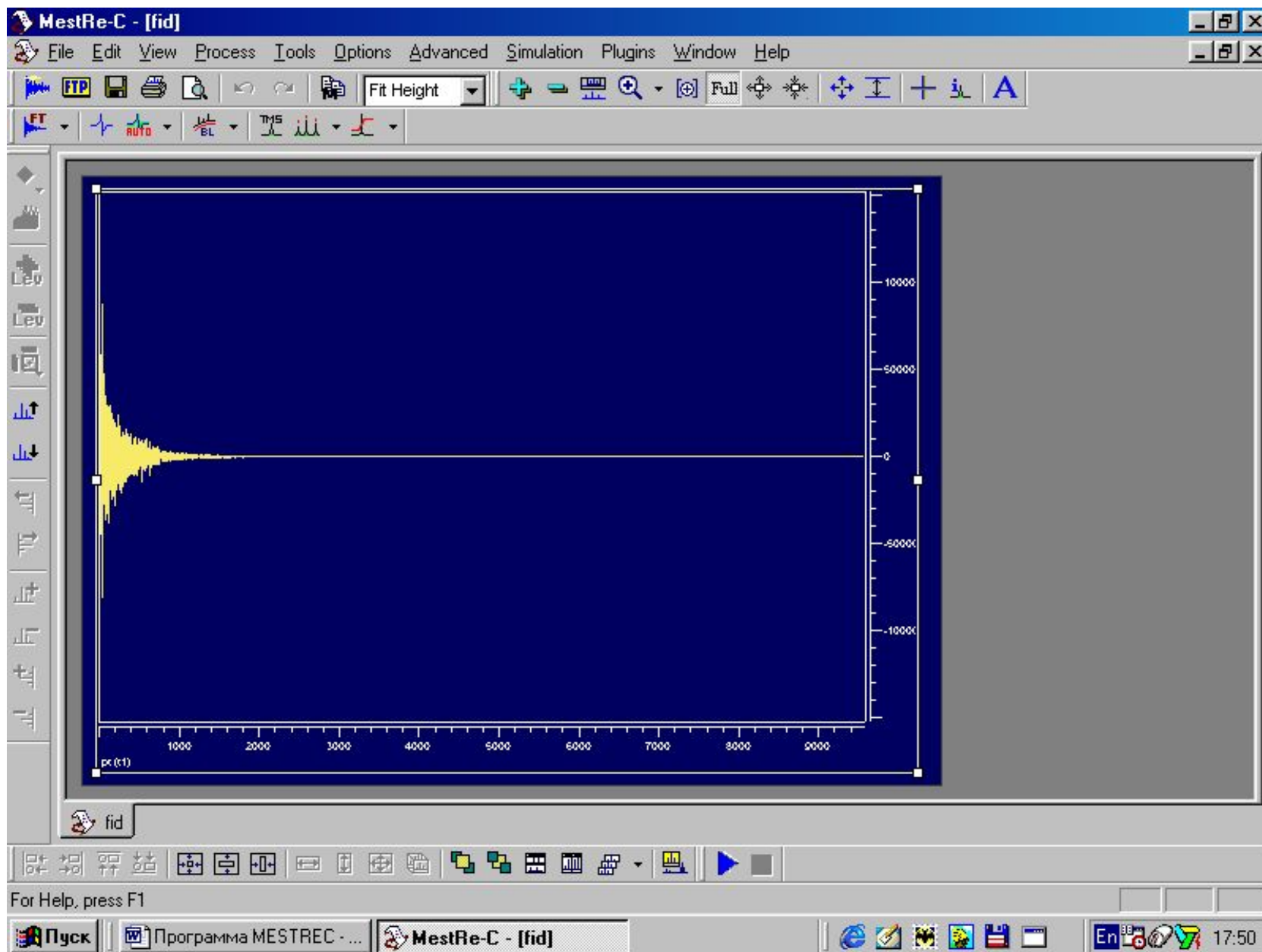
ПРИКЛАД 3 (НМВС спектр невідомої сполуки)



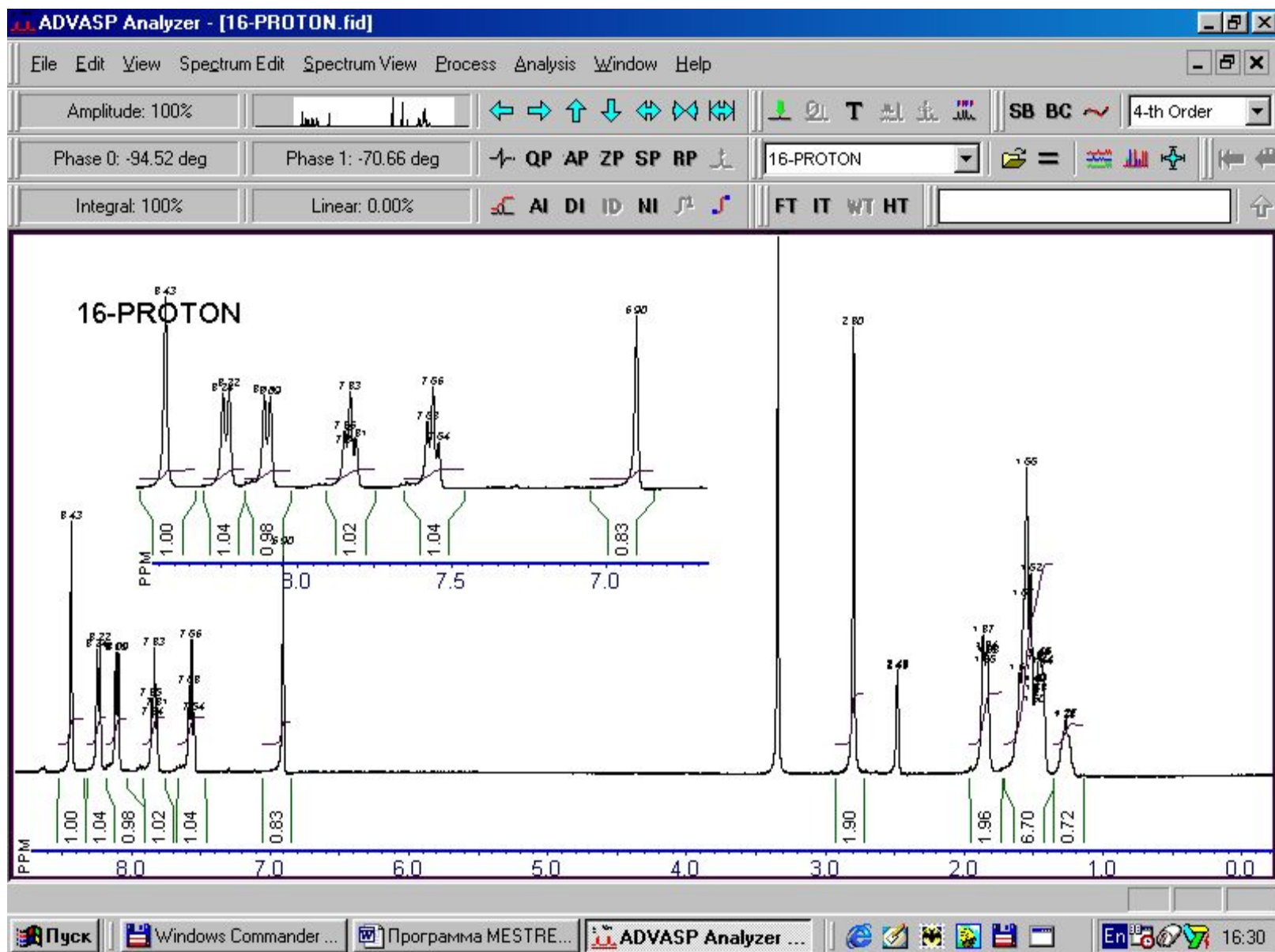
ПРИКЛАД 3 (NOESY спектр невідомої сполуки)



Програми обробки спектрів - MESTREC



Програми обробки спектрів - ADVASP



Програми обробки спектрів – ACD NMR

