



СПЕКТРОСКОПІЯ ЯМР НА ЯДРАХ ^{13}C



ПОРІВНЯЄМО ВЛАСТИВОСТІ ЯДЕР ІЗОТОПІВ ^{13}C ТА ^1H

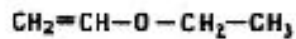
	^1H :	^{13}C :
СПІН ЯДРА	$1/2$	$1/2$
ЛАРМОРОВА ЧАСТОТА ν_0 (МГц) В ПОЛІ 9.4 Тл	400.0	100.6
ПРИРОДНИЙ ВМІСТ ІЗОТОПУ	99.98%	1.11%
ЧУТЛИВІСТЬ СИГНАЛУ ЯМР ПРЯМО ПРОПОРЦІЙНА $(\nu_0)^3$ ТА ПРИРОДНОМУ ВМІСТУ ІЗОТОПУ		
ВІДНОСНА ЧУТЛИВІСТЬ СИГНАЛУ ЯМР	1	$1.76 \cdot 10^{-4}$



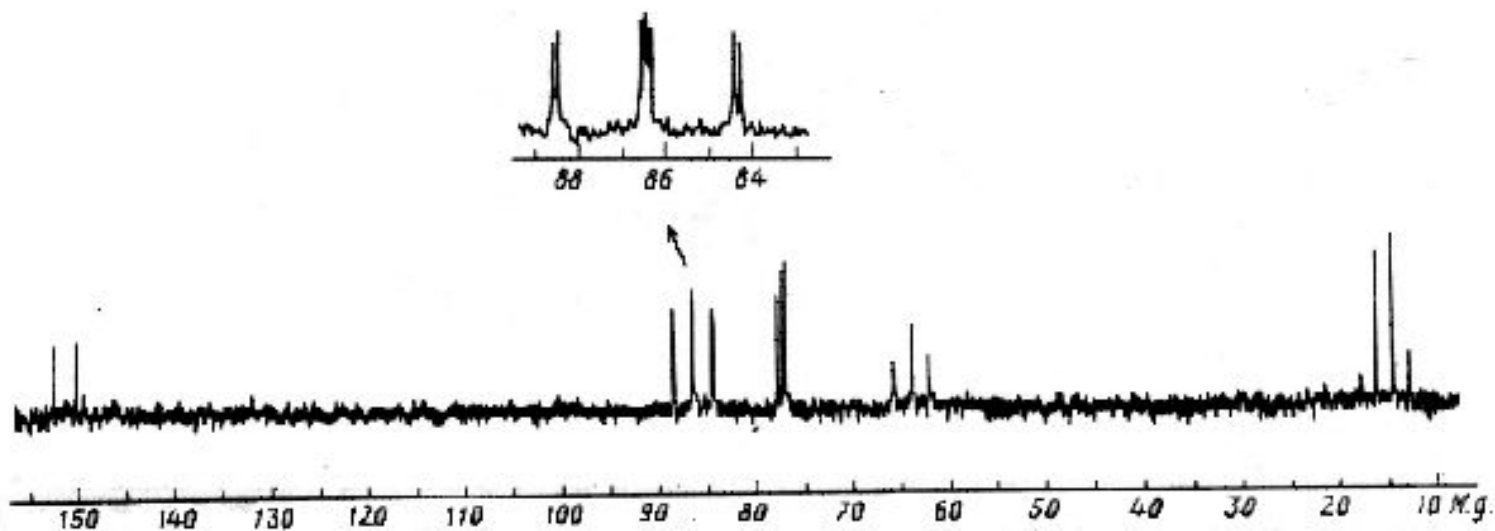
ПРИКЛАД СПЕКТРУ ЯМР ^{13}C

ЕТАЛОН – ТЕТРАМЕТИЛСИЛАН, ШКАЛА ХІМІЧНИХ ЗСУВІВ – МІЛЬЙОННІ ЧАСТКИ

ДЛЯ РОЗЧИНЕННЯ ЗРАЗКІВ ВИКОРИСТОВУЮТЬ ДЕЙТЕРОВАНІ РОЗЧИННИКИ, СИГНАЛИ ЯКИХ СЛІД ОЧІКУВАТИ В СПЕКТРАХ

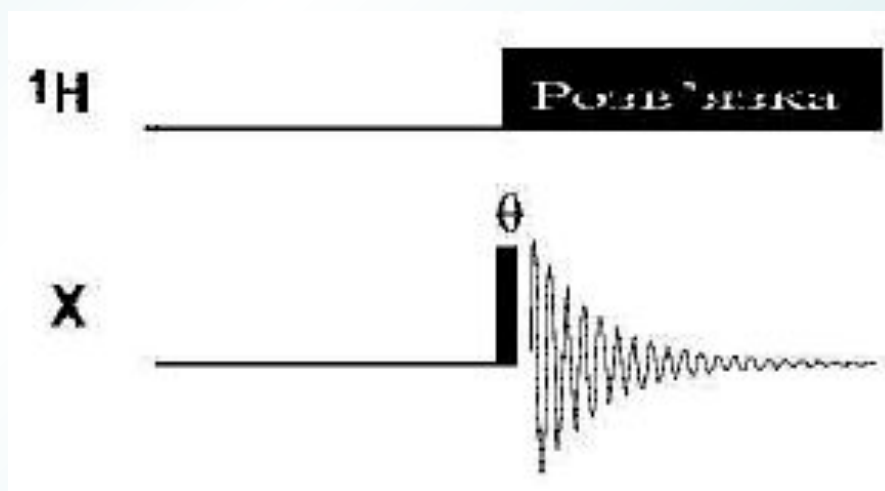
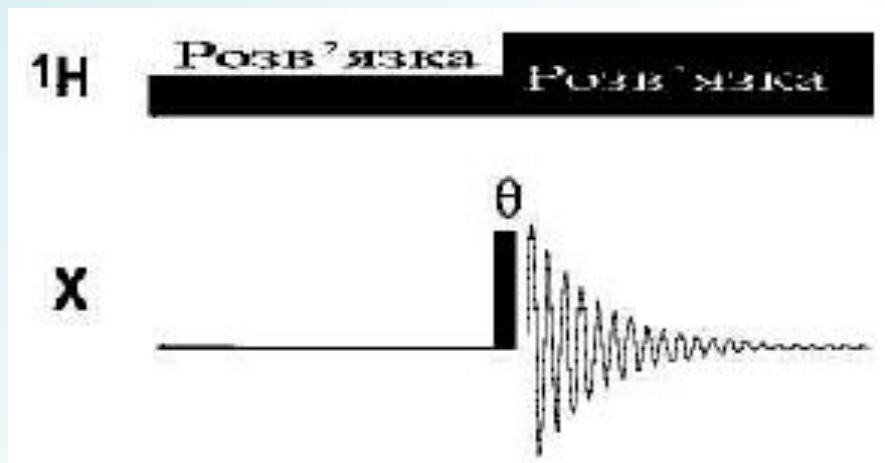


ІНТЕГРАЛЬНА ІНТЕНСИВНІСТЬ СИГНАЛІВ ЯМР ^{13}C ВИКОРИСТОВУЄТЬСЯ РІДКО



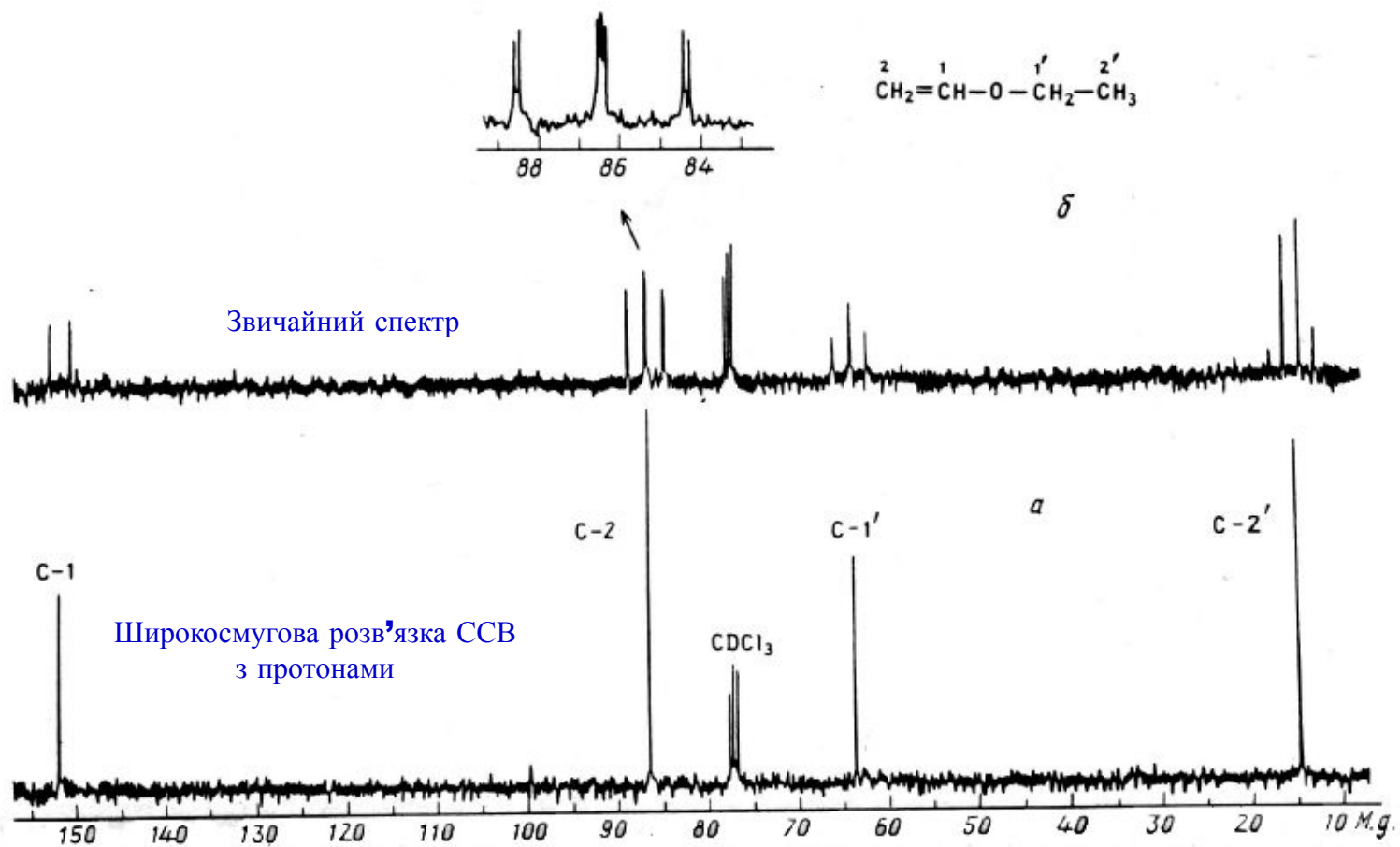


РЕЄСТРАЦІЯ СПЕКТРІВ ЯМР ^{13}C З РОЗВ'ЯЗКОЮ СПІН-СПІНОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ З ПРОТОНАМИ (ШИРОКОСМУТОВИМ ДЕКАПЛІНГОМ)



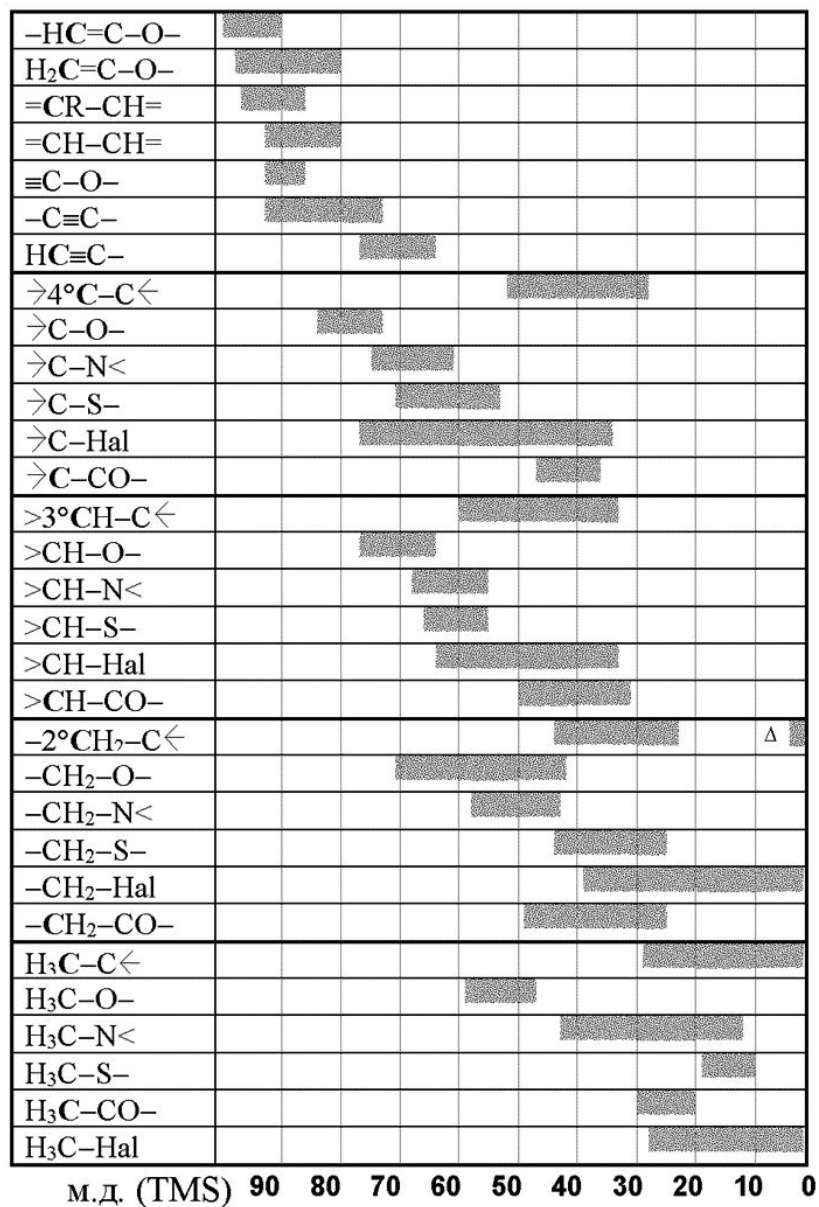


ПРИКЛАД СПЕКТРУ ЯМР ^{13}C





ХІМІЧНІ ЗСУВИ СИГНАЛІВ ЯМР ^{13}C





ПОЛОЖЕННЯ В СПЕКТРАХ ЯМР ^{13}C СИГНАЛІВ МЕТИЛЬНИХ ГРУП

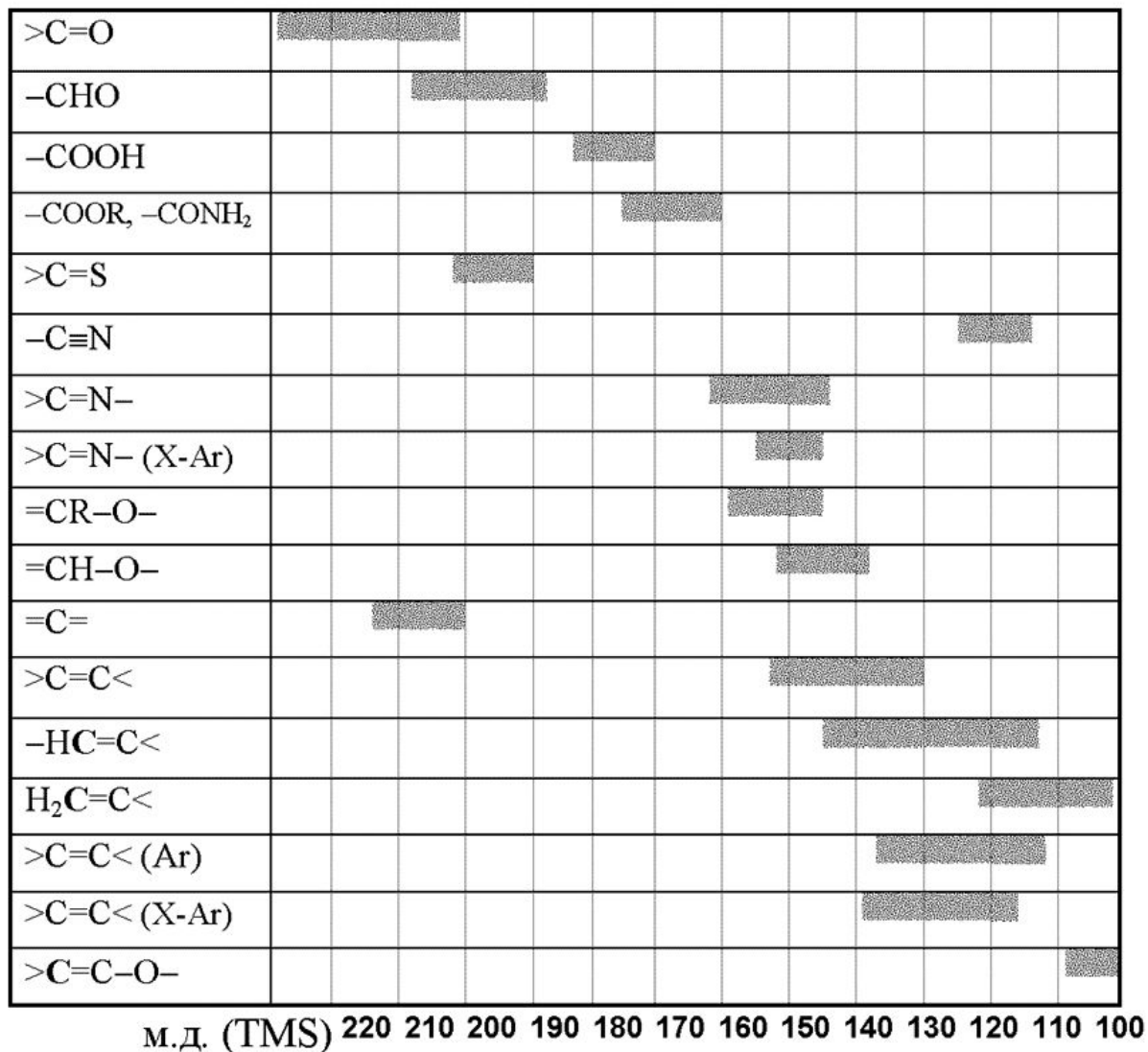
CH_4 -2,1	$\text{CH}_3\text{-CH}_3$ 5,9	Et-CH_3 15,6	$\text{HC(CH}_3)_2$ 24,3	CH_3Cl 22,0
CH_3Br 14,0	CH_3J -21	CH_3OH 49,3	CH_3OCH_3 59,4	CH_3OPh 54,0
CH_3OCOPh 51,3	CH_3COPh 24,9	CH_3COCH_3 29	CH_3Ph 21,0	CH_3CN 0,5
$\text{N(CH}_3)_3$ 47,5	CH_3NO_2 57,3	CH_3SCH_3 19,5	CH_3SOCH_3 43,5	$(\text{CH}_3)_4\text{C}$ 31,5

ВИСНОВОК: ЕЛЕКТРОННІ ЕФЕКТИ ЗАМІСНИКІВ ЗНАЧНО ВПЛИВАЮТЬ НА ПОЛОЖЕННЯ СИГНАЛІВ ЯМР ^{13}C

МАГНІТНА АНІЗОТРОПІЯ ЗВ'ЯЗКІВ ТА ГРУП МАЄ МЕНШИЙ ВПЛИВ, ПОРІВНЯНО ЗІ СПЕКТРОСКОПІЄЮ ЯМР ^1H

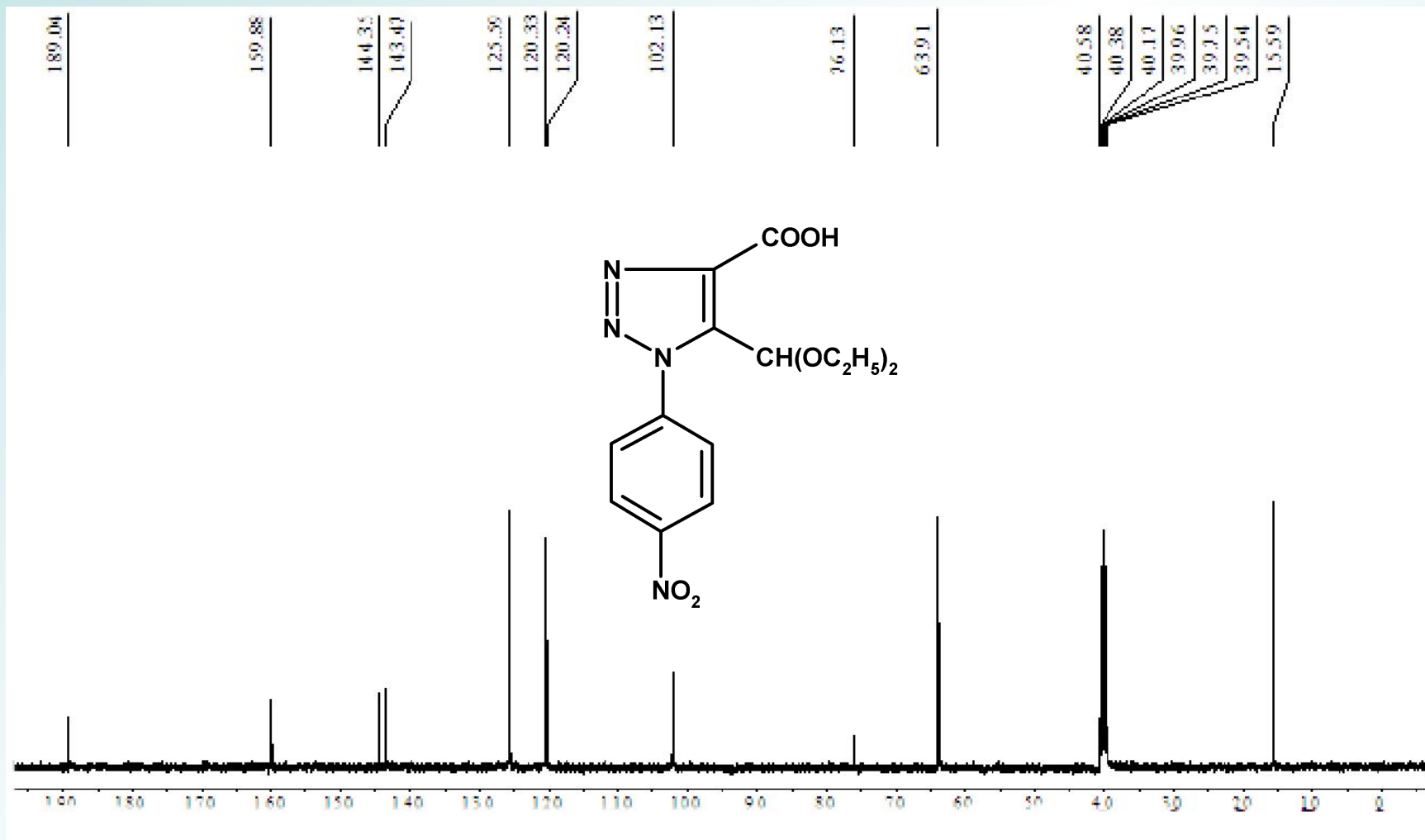


ХІМІЧНІ ЗСУВИ СИГНАЛІВ ЯМР ^{13}C



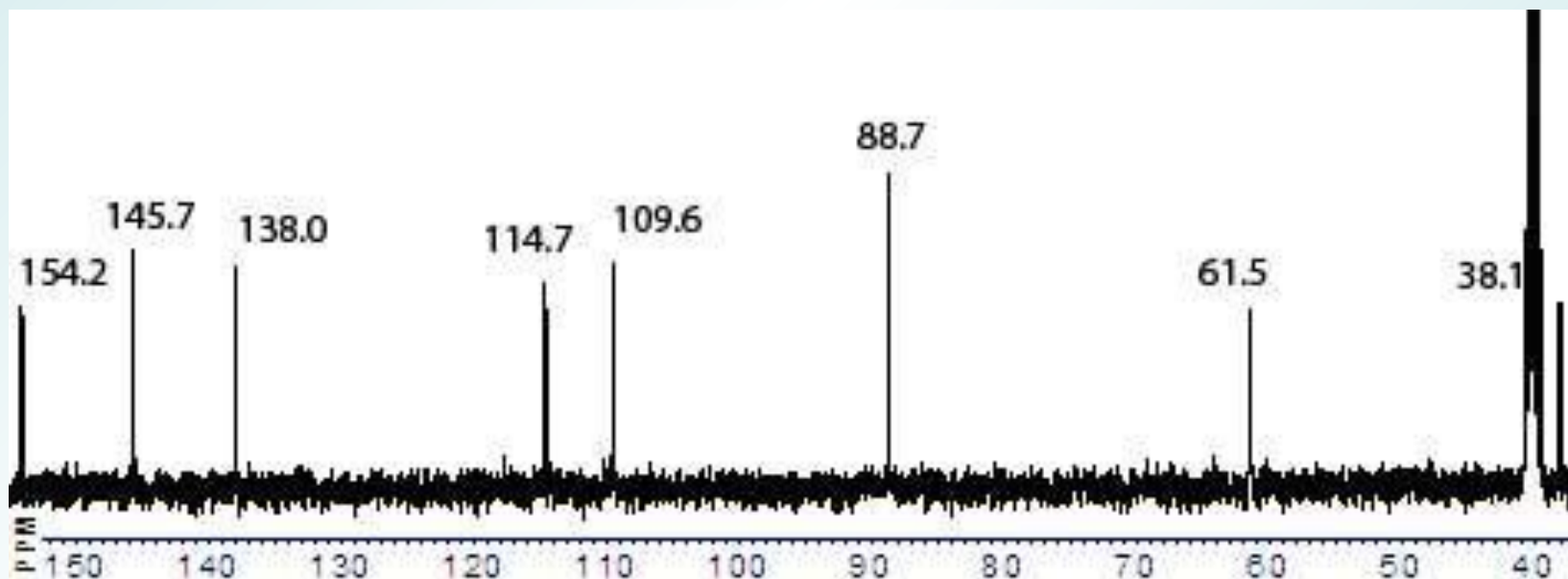
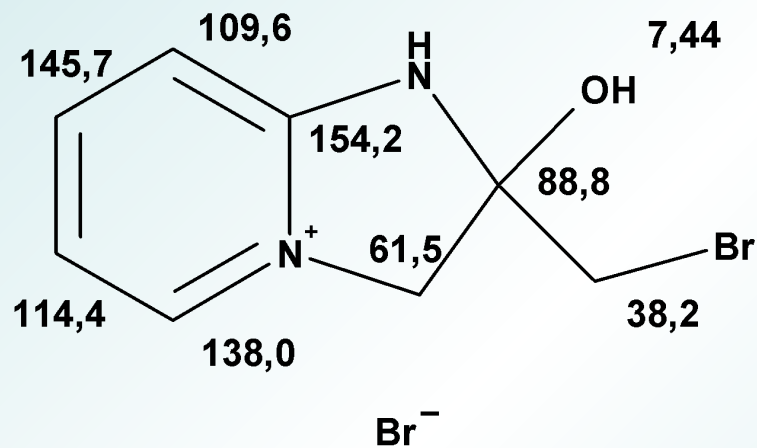


ПРИКЛАД СПЕКТРУ ЯМР ^{13}C – АНАЛІЗ СИМЕТРІЇ СПОЛУКИ





АНАЛІЗ СПЕКТРУ ЯМР ^{13}C





ОСНОВНІ КССВ ^{13}C - ^1H

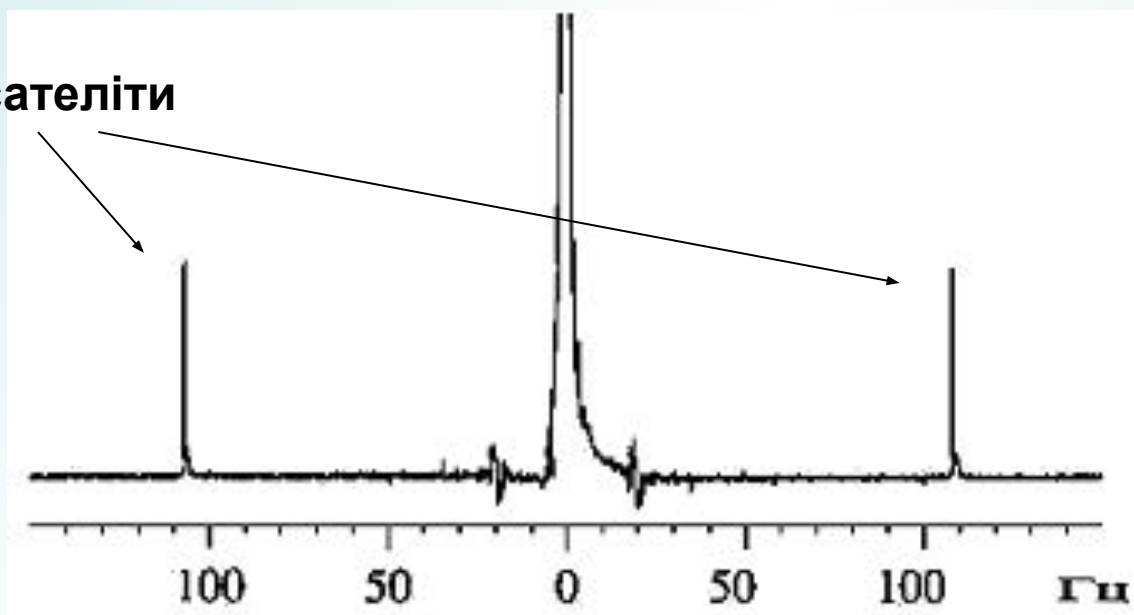
$sp^3\text{C—H}$	125..135
$sp^2\text{C—H}$	155..172
$sp\text{C—H}$	248..251
$sp^3\text{C—}sp^3\text{C—H}$	-2..-5
$sp^3\text{C—}sp^2\text{C—H}$	0..5 (C=C), 26..30 (C=O)
$sp^2\text{C—}sp^3\text{C—H}$	-6 (толуол)
$sp^2\text{C—}sp^2\text{C—H}$	1..3
$sp\text{C—}sp^3\text{C—H}$	-11..-9
$sp\text{C—}sp^2\text{C—H}$	32..36 (C=O)
$sp\text{C—}sp\text{C—H}$	50..55
C—C—C—H	0..8 **
C—C=C—H	5..11
C=C—C—H	4..10
$\text{C—C}\equiv\text{C—H}$	3..4
C—X—C—H	3..5

** залежить від торсійного кута



ПРОЯВ ССВ ^{13}C - ^1H В ПРОТОННИХ СПЕКТРАХ

^{13}C -сателіти





РЕДАГУВАННЯ ^{13}C -ЯМР СПЕКТРІВ

