



**LABORATORIUM
TAJEMNIC**

SPEKTROSKOPIA NMR

BARBARA PACHOLCZYK-SIENICKA

ŁÓDŹ, 18/11/2025

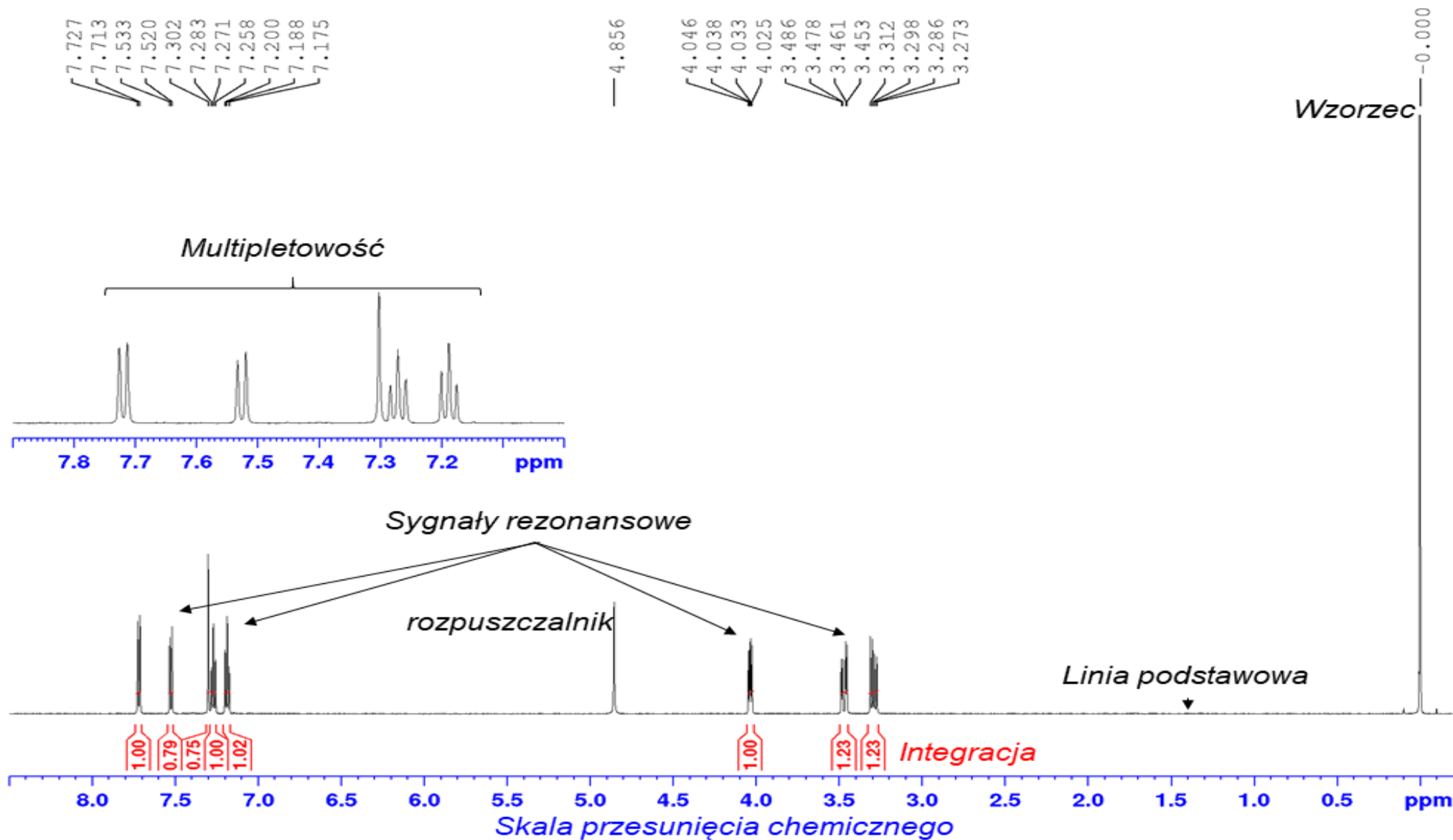


Podział jąder według ich własności magnetycznych

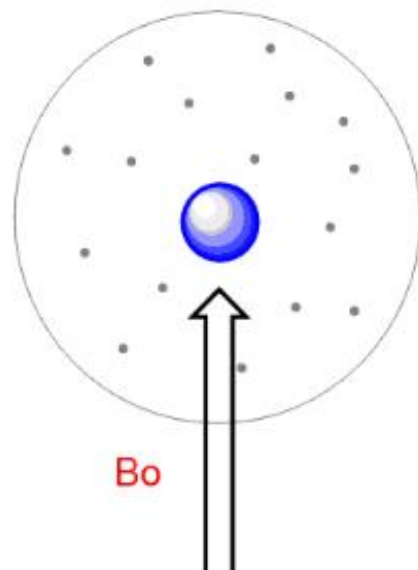
Wartość spinu		Właściwość jądra	
I=0		Nieczynne magnetycznie	
I =1/2 (31 izotopów)		Tylko moment magnetyczny	
I>1/2 (87 izotopów)		Moment magnetyczny, moment kwadrupolowy	
Liczba masowa		Liczba atomowa	Spin
parzysta		parzysta	0
parzysta		nieparzysta	1,2,3,....
nieparzysta		dowolna	1/2,3/2, 5/2,.....
Przykłady izotopów tego samego pierwiastka różniących się wartością spinu			
I(¹ H) = ½		I(² H) = 1	I(¹⁵ N) = ½
			I(¹⁴ N) = 1
Przykłady izotopów tego samego pierwiastka o takich samych spinach, ale różniących się wartościami jądrowych momentów magnetycznych			
I(⁷⁹ Br) = 3/2		I(⁸¹ Br) = 3/2	
γ(⁷⁹ Br) = 0.67•10 ⁸ rad/(T•s)		γ(⁸¹ Br) = 0.72•10 ⁸ rad/(T•s)	



Elementy widma ^1H NMR



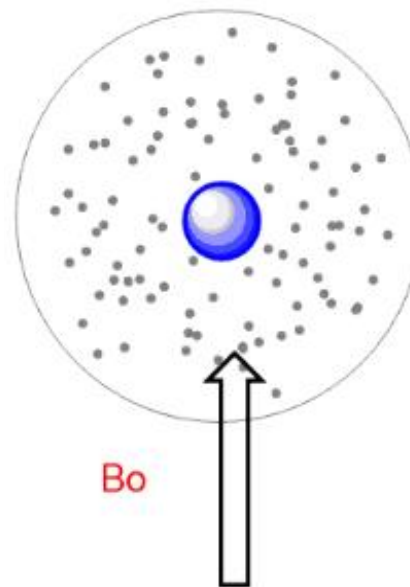
MAŁA GĘSTOŚĆ
ELEKTRONOWA



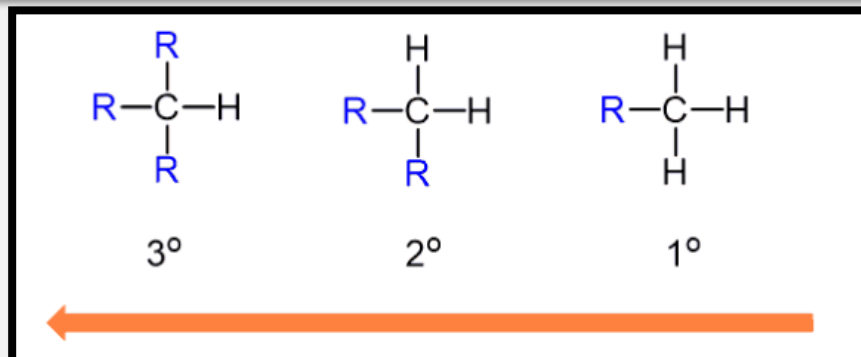
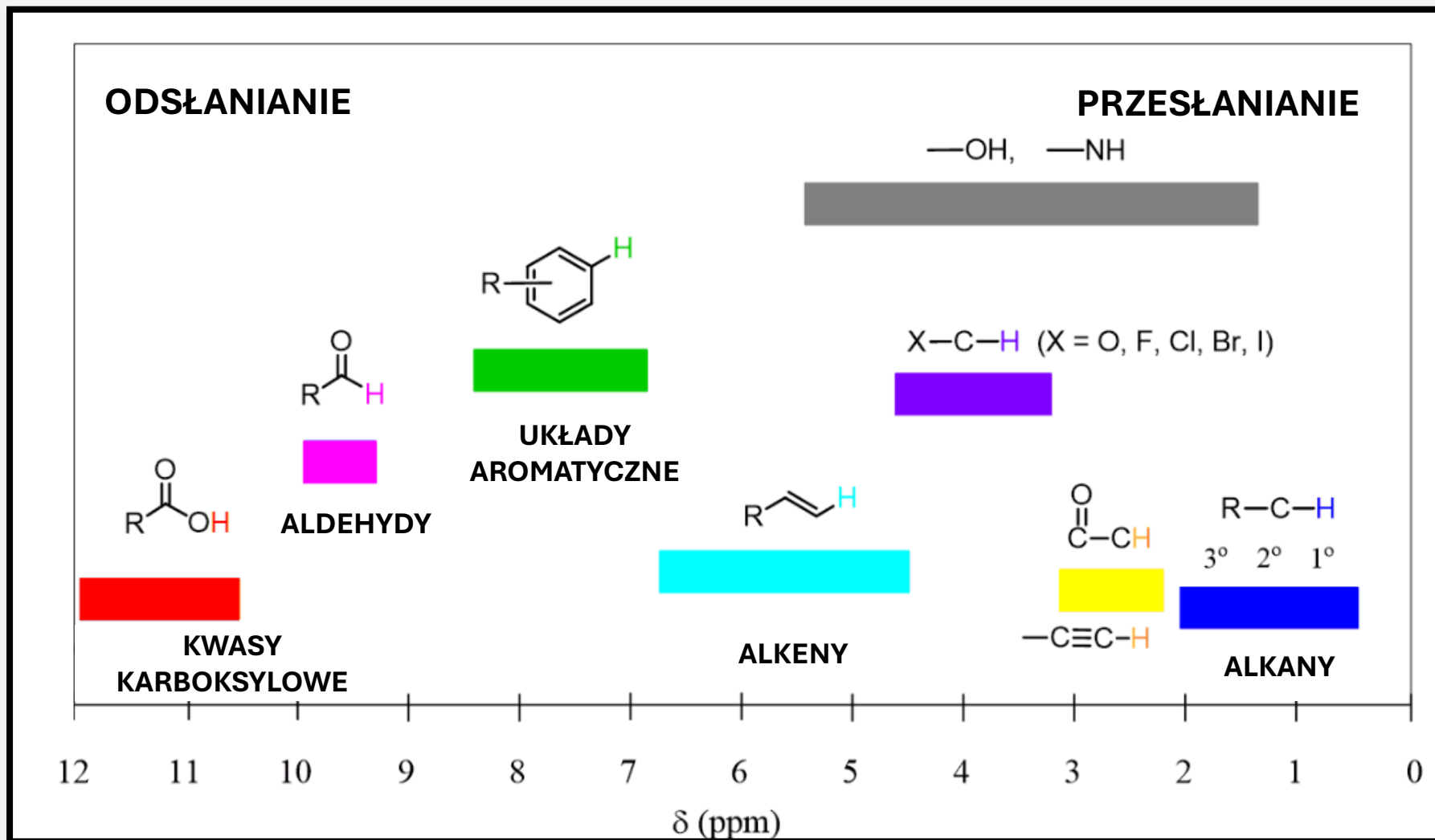
JĄDRO JEST ODSŁANIANE –
DZIAŁA NA NIE **SILNIEJSZE**
POLE MAGNETYCZNE

CHMURA
ELEKTRONOWA
PRZESŁANIA JĄDRO
PRZED DZIAŁANIEM
POŁA
MAGNETYCZNEGO

DUŻA GĘSTOŚĆ
ELEKTRONOWA



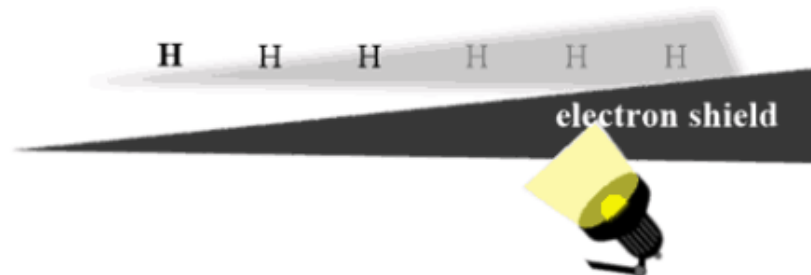
JĄDRO JEST
PRZESŁANIANE – DZIAŁA
NA NIE **SŁABSZE POLE**
MAGNETYCZNE



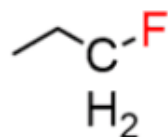
**WZROST WARTOŚCI
PRZESUNIĘCIA CHEMICZNEGO
WRAZ ZE WZROSTEM STOPNIA
PODSTAWIENIA**

PODSTAWNIKI ELEKTRONOAKCEPTOROWE

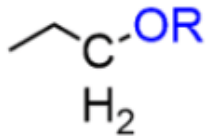
ODSŁANIANIE
Wyższa częstotliwość



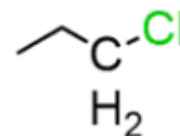
PRZESŁANIANIE
niższa częstotliwość



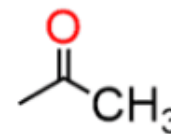
~ 4.5



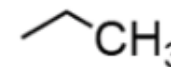
~ 4



~ 3.5

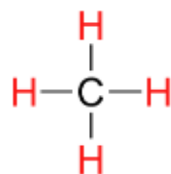


~ 2.5

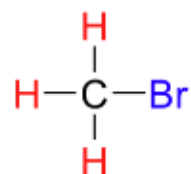


~ 1

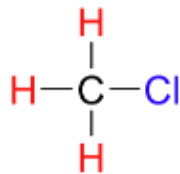
ppm



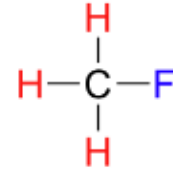
0.23 ppm



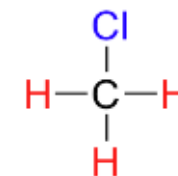
2.68 ppm



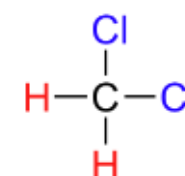
3.05 ppm



4.26 ppm



3.05 ppm

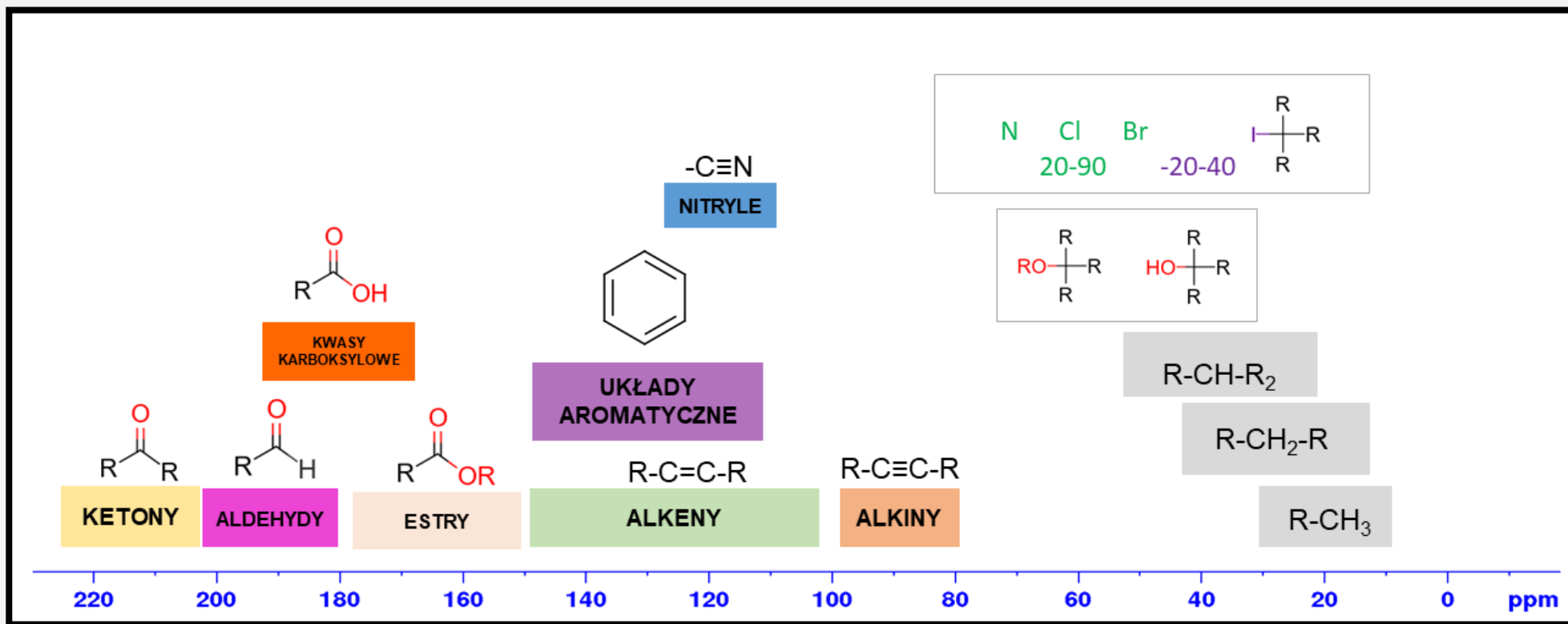


5.30 ppm



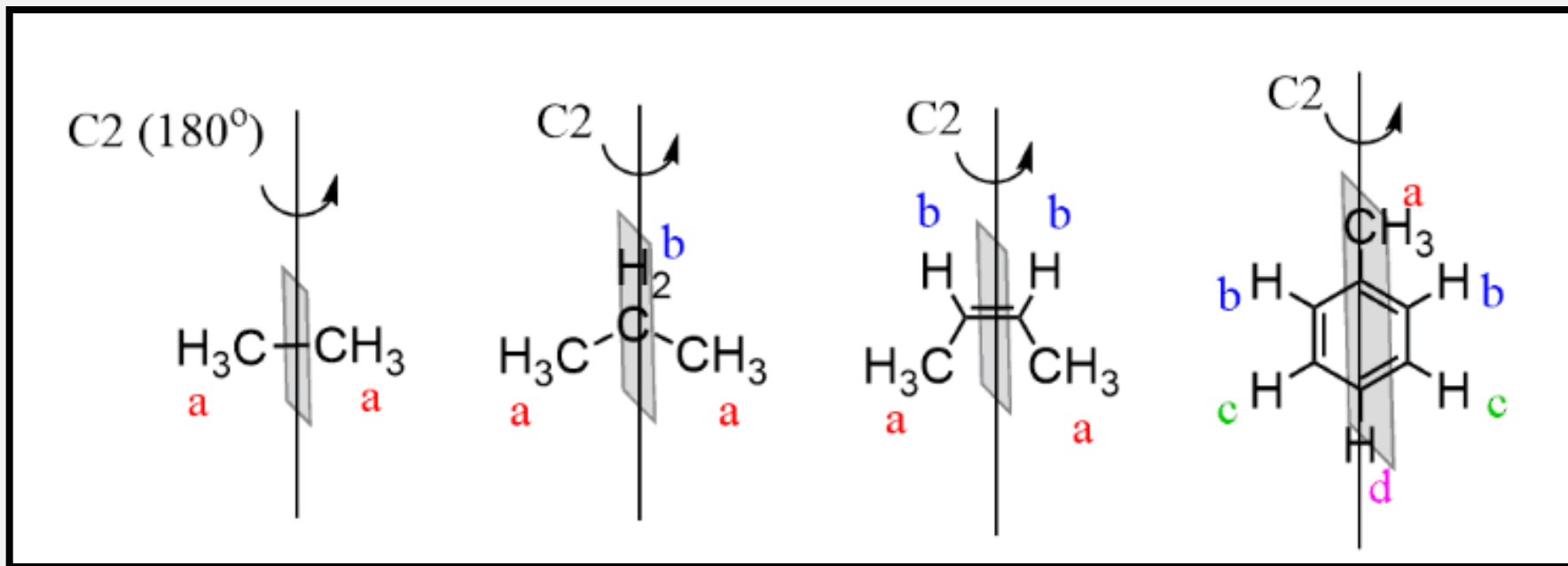
7.27 ppm

^{13}C NMR



$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	0	* $\text{I}-\text{C}$	-20 - 40	$\text{C}=\text{C}$	100 - 150	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})-\text{N}(\text{R})_2$	155 - 185
$\text{R}-\text{CH}_3$	8 - 30	$\text{Br}-\text{C}$	25 - 65	$\text{C}_6\text{H}_5-\text{C}-\text{H}$	110 - 170	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})-\text{OH}$	165 - 185
$\text{R}-\text{CH}_2-\text{R}$	15 - 55	$\text{Cl}-\text{C}$	35 - 80	$\text{C}=\text{N}$	150 - 170	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})-\text{OR}$	
R_3CH	20 - 60	$\text{O}-\text{C}$	40 - 80	$\text{C}\equiv\text{N}$	110 - 140	$\text{R}-\text{C}(=\text{O})-\text{H}$	190 - 220
R_4C	30 - 50	$\text{N}-\text{C}$	30 - 65			$\text{R}-\text{C}(=\text{O})-\text{R}$	

SYMETRIA – decyduje o ilości sygnałów na widmie



6 protonów, ale
1 sygnał

8 protonów, ale
2 sygnały

8 protonów, ale
2 sygnały

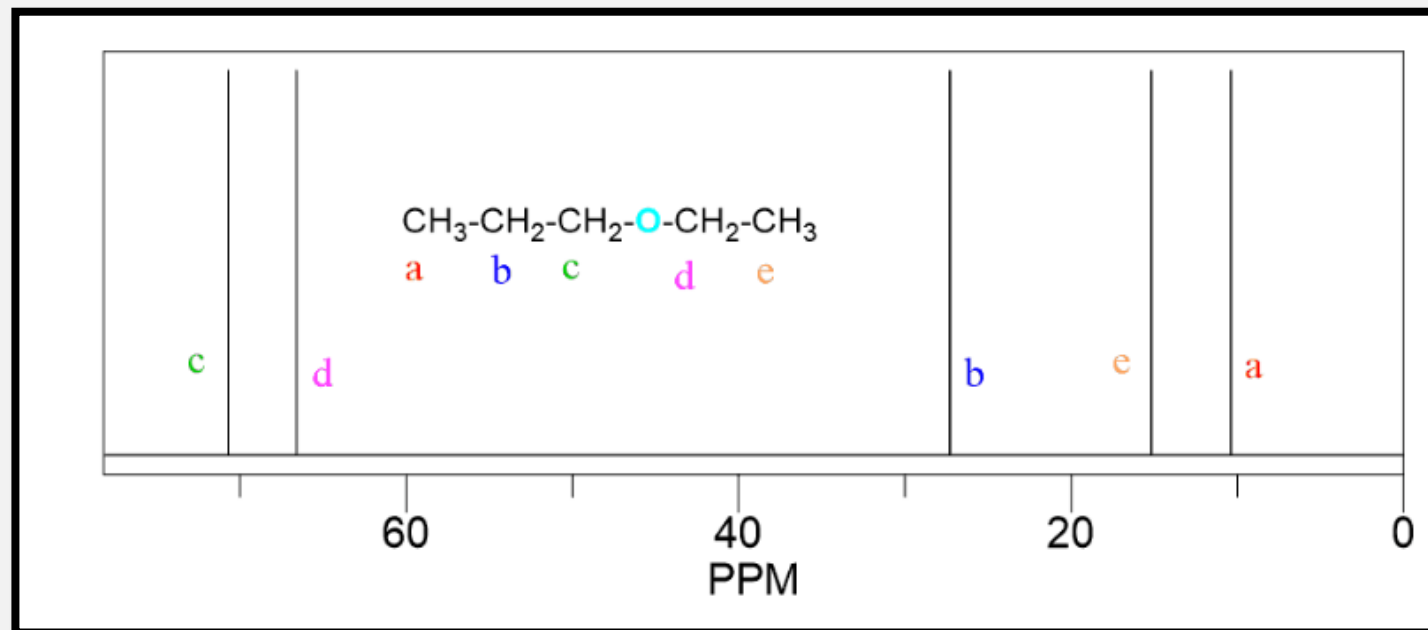
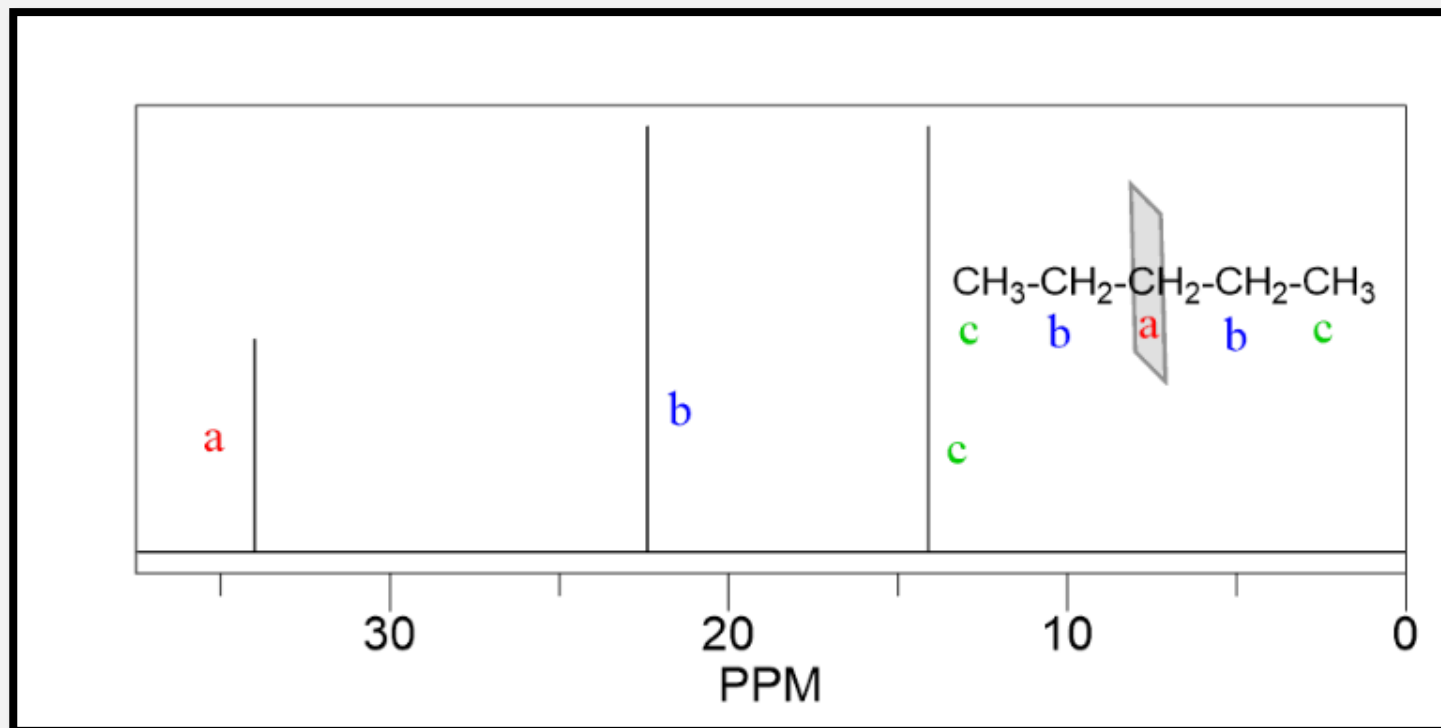
8 protonów, ale
4 sygnały

Element symetrii – jeden sygnał, protony równocenne

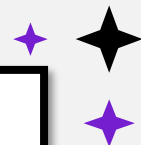
Brak elementów symetrii – kilka sygnałów, protony nierównocenne

SYMETRIA

RÓWNOCENNE



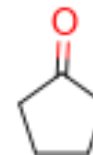
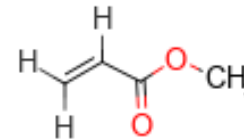
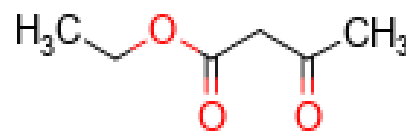
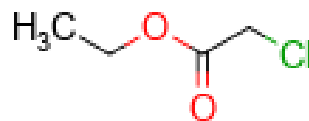
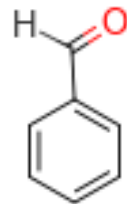
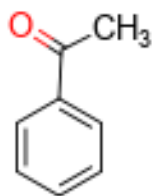
NIERÓWNOCENNE



I. Związki karbonylowe są ważnymi substratami wykorzystywanymi w syntezie różnorodnych heterocykli. Poniżej przedstawiono osiem związków **A-H** zawierających co najmniej jedną grupę karbonylową. W tabeli podano masy molowe związków **A-F** oraz dane spektroskopowe.

Związek	Masa molowa ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$)	Opis widma ^1H NMR (ppm)	Liczba sygnałów w widmie ^{13}C NMR	Informacje dodatkowe
A	120	8,0-7,9 (m, 2H), 7,6-7,4 (m, 3H), 2,6 (s, 3H)	6	
B	106	10,0 (s, 1H), 7,9-7,5 (m, 5H)	5	
C	122,5	1,4 (t, 3H), 4,1 (s, 2H), 4,3 (q, 2H)	4	zawiera chlor
D	130	1,3 (t, 3H), 2,3 (s, 3H), 3,4 (s, 2H), 4,2 (q, 2H)	6	
E	86	3,8 (s, 3H), 5,8 (dd, 1H), 6,1 (dd, 1H), 6,4 (dd, 1H)	4	zawiera 55,8% _{mas} C
F	84	2,3-2,1 (m), 2,0-1,8 (m) względna integracja multipletów 1:1	3	zawiera 71,4% _{mas} C

(s – singlet, t – tryplet, q – kwartet, dd – dublet dubletów, m – multiplet)





LABORATORIUM
TAJEMNIC

Dziękujemy

Zapraszamy do kontaktu:

biuro@fundacja.p.lodz.pl



FUNDACJA
POLITECHNIKI ŁÓDZKIEJ



Ministerstwo
Edukacji Narodowej

Dofinansowano ze środków Budżetu Państwa, których
dysponentem jest Ministerstwo Edukacji Narodowej

