

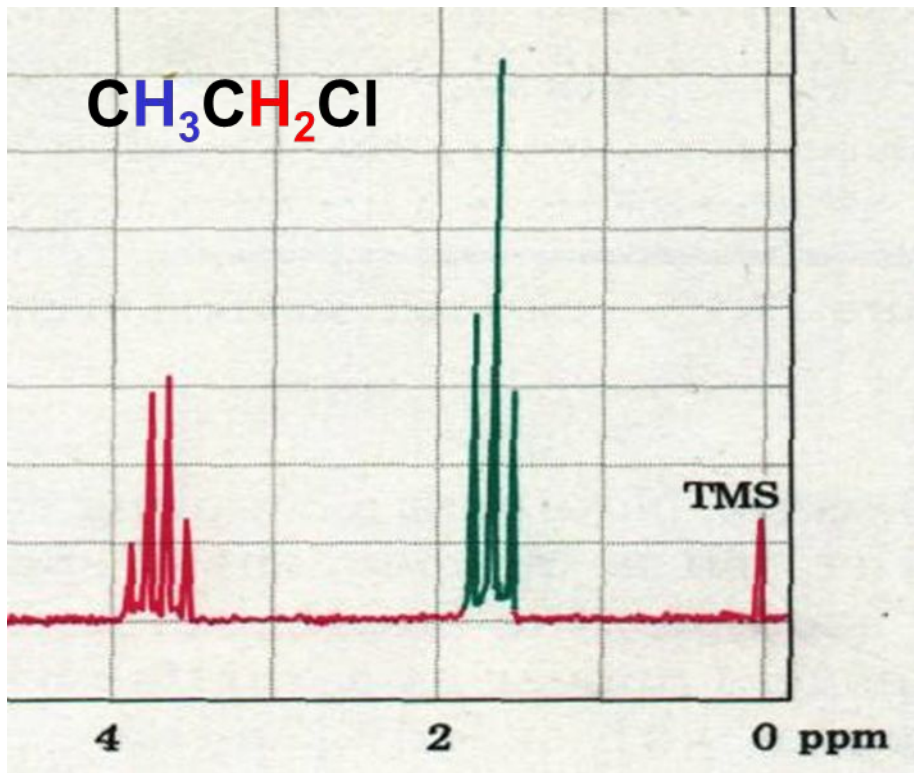
Химический сдвиг

ЯМР-спектроскопия

В общем случае для различных спиновых систем в спектроскопии ^1H ЯМР действует следующее простое правило (правило $n+1$): **мультиплетность сигнала равна числу эквивалентных протонов, взаимодействующих с протонами этого типа плюс единица.**

С использованием представления о суммарном спине целесообразно представить возможные сочетания спинов ядер в форме таблицы. В ней каждой группе сочетаний спинов отдельных ядер соответствует определенное значение m_I , что упрощает подсчет возможного числа таких сочетаний с одинаковыми m_I - а такое число, например, для A_2 есть не что иное как относительная интенсивность определенного сигнала в X-мультиплете, и наоборот.

$-\text{CH}_2-$		$m_I (-\text{CH}_2-)$	$-\text{CH}_3$			$m_I (-\text{CH}_3)$
+1/2 +1/2		1 (1)	+1/2 +1/2 +1/2			3/2 (1)
+1/2 -1/2	-1/2 +1/2	0 (2)	+1/2 -1/2+1/2	+1/2+1/2 -1/2	-1/2 +1/2+1/2	1/2 (3)
-1/2 -1/2		-1 (1)	+1/2-1/2-1/2	-1/2+1/2-1/2	-1/2 -1/2 +1/2	-1/2 (3)
			-1/2 -1/2 -1/2			-3/2 (1)

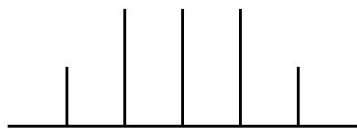


протоны CH_3 -группы взаимодействуют с протонами $-\text{CH}_2$ -группы с образованием триплета (интенсивности компонент 1:2:1), и наоборот: сигнал $-\text{CH}_2$ -группы представляет собой квадруплет (интенсивности компонент 1:3:3:1, по числу эквивалентных состояний $-\text{CH}_3$ - компоненты).

Для определения относительных интенсивностей линий в любом мультиплете удобно использовать треугольник Паскаля.

Треугольник Паскаля

Число соседних ядер	Наблюдаемая интегральная интенсивность линий	Название и общепринятое обозначение мультиплета
0	1	синглет, s
1	1 1	дублет, d
2	1 2 1	триплет, t
3	1 3 3 1	квадруплет (квартет), q
4	1 4 6 4 1	квинтиплет (квинтет), p
5	1 5 10 10 5 1	секстиплет (секстет)
6	1 6 15 20 15 6 1	септиплет (септет)
7	1 7 21 35 35 21 7 1	октиплет (октет)

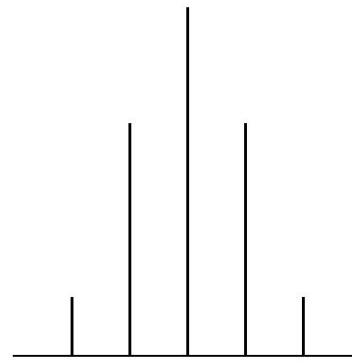


1:2:2:2:1

≡



1:2:1 + 1:2:1



**"ИСТИННЫЙ"
КВИНТЕТ**