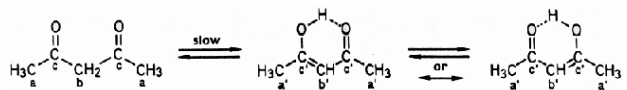
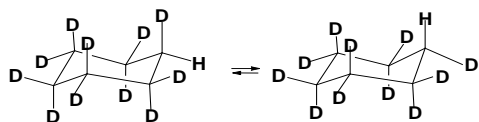


## Az NMR spektrum hőmérsékletfüggése, dinamikus NMR spektroszkópia

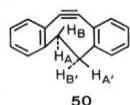
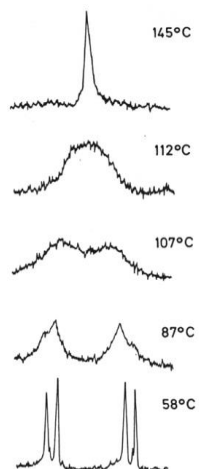


A cserefolyamatok típusai:  
 konformációs egyensúly (gyűrűinverzió, gátolt rotáció)  
 tautomer egyensúly  
 komplex egyensúly

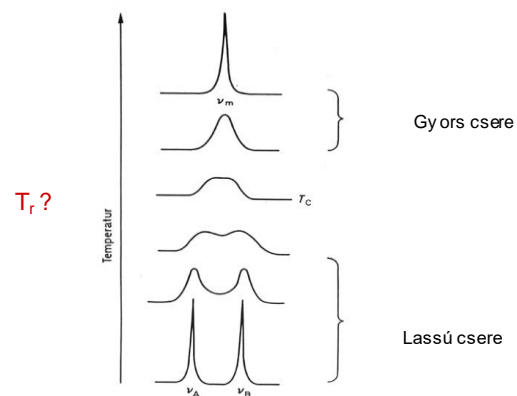
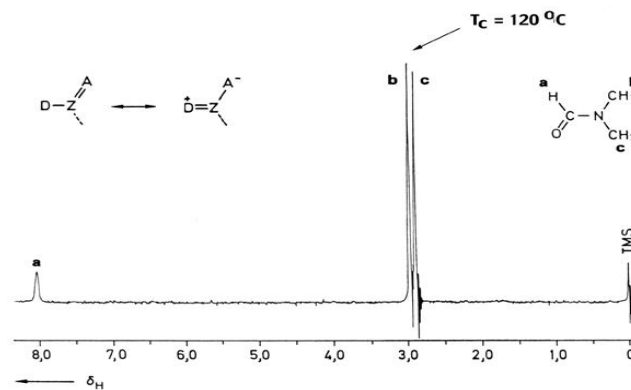
Kéthely-csere



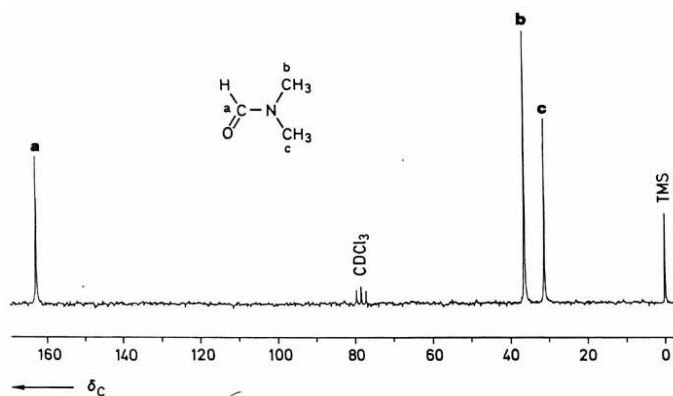
Példa:  
 Konformációs  
 egyensúly



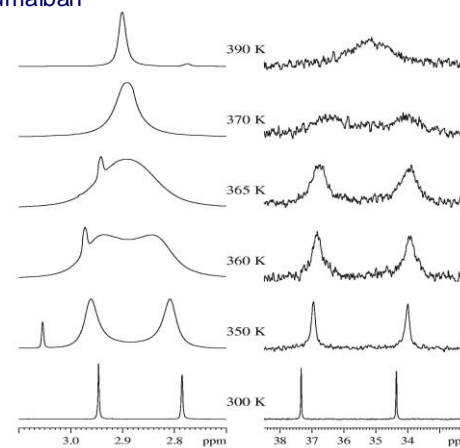
## Az NMR spektrum hőmérsékletfüggése, dinamikus NMR

Gátolt rotáció észlelése <sup>1</sup>H-NMR spektrumban: DMF

Gátolt rotáció észlelése  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumban: DMF



Gátolt rotáció : Koaleszcencia mérése DMF  $^1\text{H}$  és  $^{13}\text{C}$  spektrumaiban



Kéthely-csere leírása : Eyring egyenlet

$$k = \frac{RT}{N \cdot h} e^{-\frac{\Delta G^\ddagger}{RT}} \quad v_m = \frac{v_A + v_B}{2}$$

$$\Delta G^\ddagger = RT_c \cdot \ln \frac{RT_c \sqrt{2}}{\pi \cdot N \cdot h |v_A - v_B|}$$

$$\Delta G^\ddagger = 19 \cdot 10^{-3} \cdot T_c (9,97 + \log T_c - \log |v_A - v_B|)$$

$v_A$  és  $v_B$  a végtelen lassú csere esetén mért individuális kémiai eltolódások

$T_c$  a hőmérsékletfüggő kísérletsorozatból meghatározható koaleszcenciahőmérséklet

Meghatározható a  $\Delta G$  aktiválási szabadentalpia

Elv álasztható-e a két species ?

