

**Конспект
на курса „ЯМР в органометалната химия“**

1. Въведение в рутинните измервания на ЯМР спектри на различни ядра (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P , ^{29}Si , ^{195}Pt и др.). Дипол-диполна релаксация. Анизотропия на химичното отместване.
2. Приложение на COSY, HSQC и HMBC двумерните ЯМР техники в органометалната химия. 2Д ^1H - ^1H корелация, 2Д ^{13}C - ^1H корелация през една връзка. 2Д ^{15}N - ^1H корелация през една връзка. 2Д ^{13}C - ^1H корелация през две и три връзки. 2Д X- ^1H корелация през две и три връзки.
3. Ефекти на Оверхаузер в органометалната химия. X- ^1H ефекти на Оверхаузер. 2Д NOESY. NOESY. Метални комплекси и ефекти на Оверхаузер. Сравнение на NOESY и ROESY.
4. Определяне на коефициентите на трансляционна дифузия чрез градиентна ЯМР спектроскопия в органометалната химия.
5. Специфика на ЯМР химичните отмествания в органометалната химия. ^1H химични отмествания при: хидриди; молекулен H_2 и η^2 -H-X-M комплекси (X=C, Si, или H); σ -свързани алкилни групи; η^2 -, η^4 -олефини и η^6 -арени; алилни и Sr аниони; карбенови лиганди. ^{13}C химични отмествания при: σ - и η -свързани комплекси; ацетиленови комплекси; лилни и Sr аниони; карбенови комплекси; NHC лиганди и комплекси. ЯМР химичните отмествания на ^{15}N , ^{19}F , ^{31}P и ядра на преходни метали.
6. ЯМР константи на спин-спиново взаимодействие в органометалната химия. Взаимодействие през една връзка и приложение на ^1J константата на спин-спиново взаимодействие. Транс влияние и ^1J константата на спин-спиново взаимодействие. Взаимодействие през две и три връзки между ^1H и ^{31}P . Константи на спин-спиново взаимодействие ^{13}C и ^{31}P . Геометрични зависимости на константите $^2\text{J}\{\text{L}^1\text{-M-L}^2\}$
7. Динамичен ЯМР в органометалната химия. Спектри при променлива температура. Анализ на формата на линията. Пренос на магнетизация. Двумерни ЯМР спектри и химичен обмен.

Литература

1. Terence Mitchell, NMR – From Spectra to Structures, Springer 2007
2. Olaf Kühl, Phosphorus-31 NMR Spectroscopy, Springer 2008
3. Claridge T. High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Elsevier 2009
4. Paul S. Pregosin, NMR in Organometallic Chemistry, Wiley 2012.

Съставил:

/доцент д-р Николай Василев/