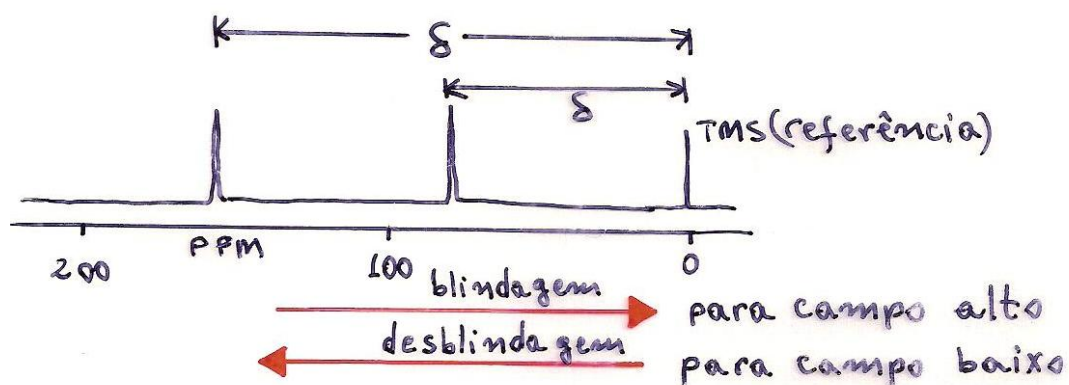


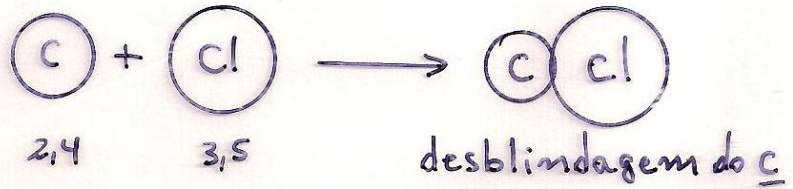
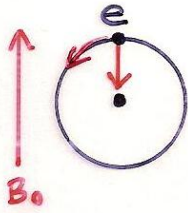
O DESLOCAMENTO QUÍMICO

DEFINIÇÃO: Deslocamento químico é a separação em ppm's entre um sinal considerado ou tido como referência



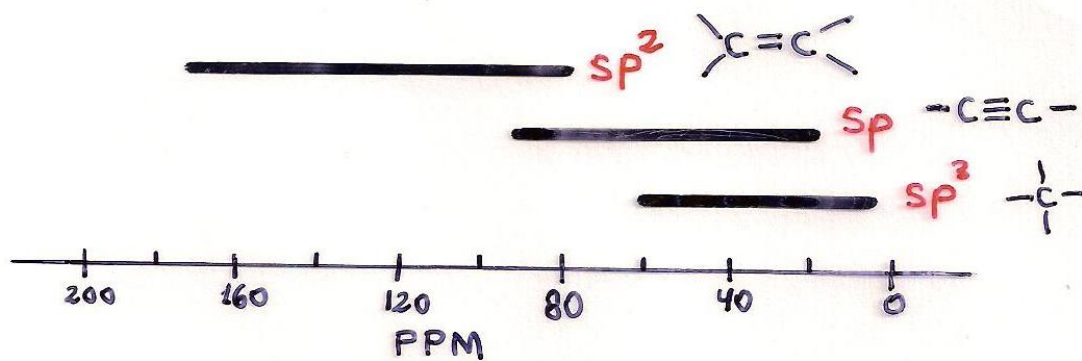
$$\delta(\text{ppm}) = \frac{100 \text{ Hz}}{100 \times 10^6} \times 10^6 = 1 \text{ ppm}$$

TEORIA DO DESLOCAMENTO QUÍMICO



FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

(a) HIBRIDIZAÇÃO



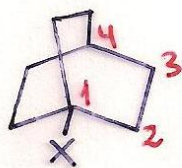
FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

(b) EFEITO INDUTIVO (EFEITO POLAR OU DA ELETRONEGATIVIDADE)

H_3C	\rightarrow	CH_2	\rightarrow	CH_2	\rightarrow	X
15,8		16,3		15,8		X = H
11,8		27,3		46,8		X = Cl
11,8		25,3		83,8		X = F
10,8		26,3		63,8		X = OH

FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

EFEITO INDUTIVO (EFEITO POLAR OU DA ELETRONEGATIVIDADE)

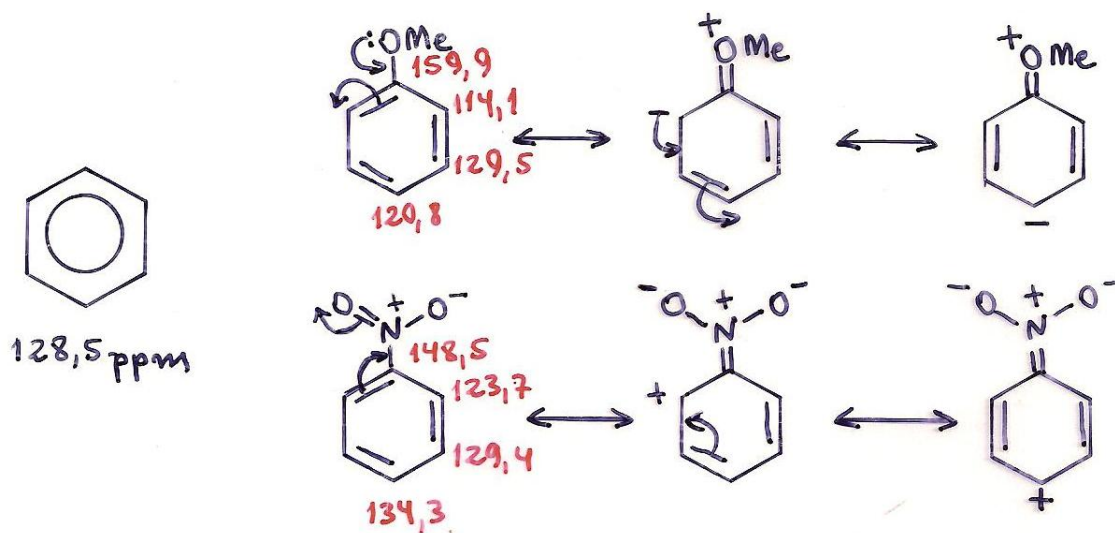


Biciclo [2,2,2] octano
1-substituído

substituinte	C-1	C-2	C-3	C-4
H	23,9	26,0	26,0	23,9
OCH ₃	72,3	29,3	26,9	24,2
F	92,4	31,2	27,3	24,2
Cl	66,2	36,2	28,2	23,3
Br	62,8	37,5	29,0	22,7

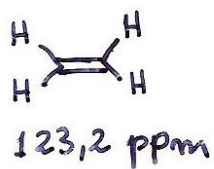
FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

(b) EFEITO MESOMÉRICO (EFEITO DE RESSONÂNCIA)



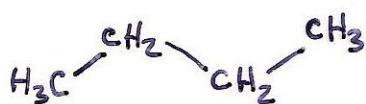
FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

EFEITO MESOMÉRICO (EFEITO DE RESSONÂNCIA)

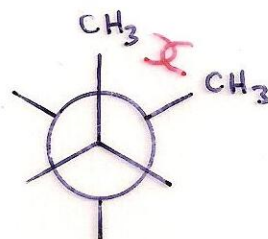


FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

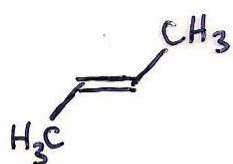
(c) EFEITO DA COMPRESSÃO ESTÉRICA (EFEITO γ)



anti



gauche

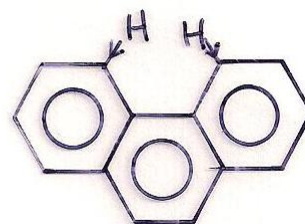


δ_{CH_3}

17,3

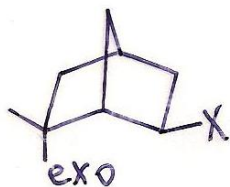
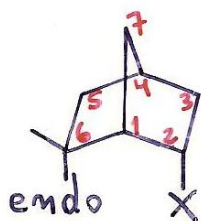


10,6



FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

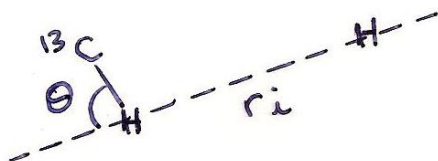
EFEITO DA COMPRESSÃO ESTÉRICA (EFEITO γ)



$$\Delta\delta = \delta_{\text{endo}} - \delta_{\text{exo}}$$

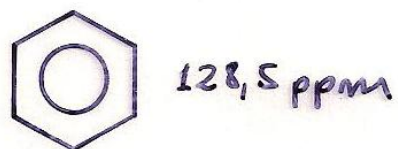
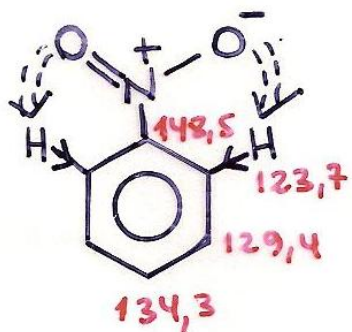
Valores de $\Delta\delta$ (ppm) (-) blindagem

X	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	CX
CN	-2,1	-0,9	-0,8	0,5	0,8	-3,3	1,3	-0,8
CH ₃	-1,3	-2,2	0,2	0,9	0,3	-6,6	3,9	-4,9
NH ₂	-2,1	-2,0	-1,9	1,6	1,8	-6,4	4,7	—
OH	-1,4	-1,9	-2,8	1,9	1,5	-4,5	3,2	—



FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

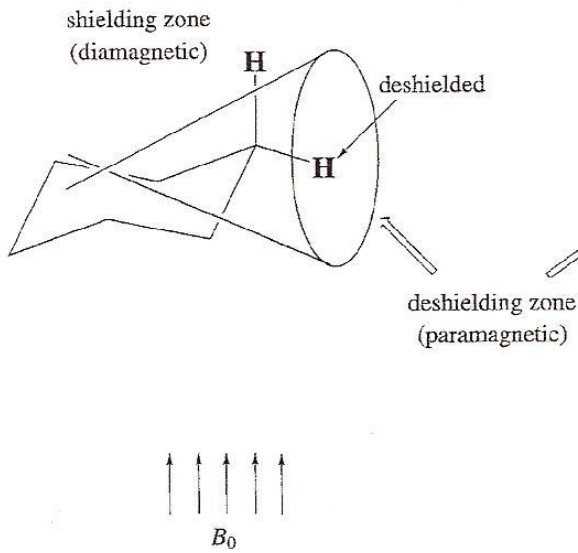
(d) EFEITO DO CAMPO ELÉTRICO



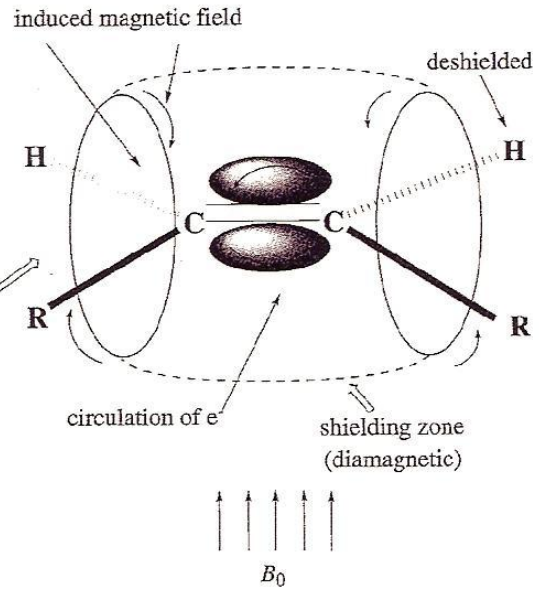
FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

(e) EFEITO DA ANISOTROPIA MAGNÉTICA

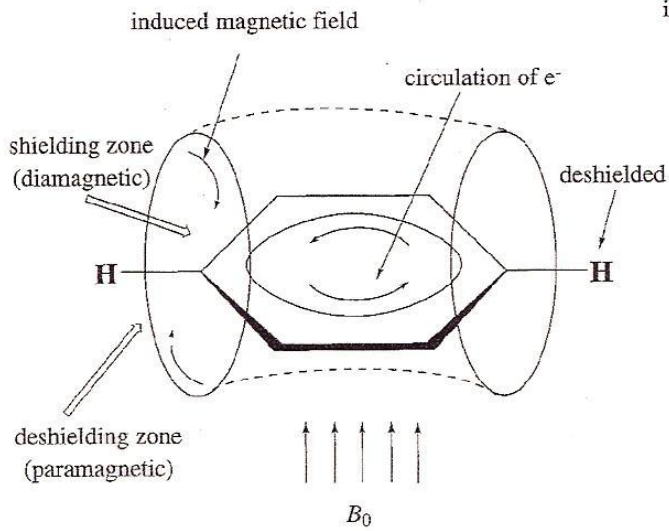
(a) Single bonds



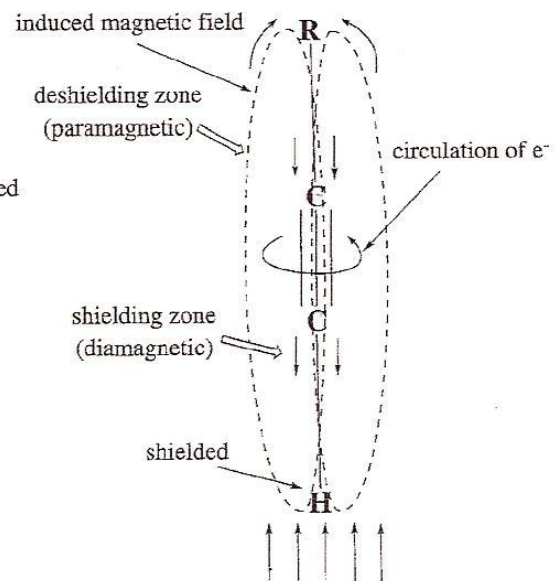
(b) Double bonds



(c) Ring current at aromatic bonds



(d) Triple bonds



FATORES QUE AFETAM O DESLOCAMENTO QUÍMICO

(g) EFEITO DO ÁTOMO PESADO

CH_3	—	CH_2	—	CH_2	—	X
15,8		16,3		15,8		X = H
11,5		26,5		46,7		X = Cl
13,2		26,8		35,7		X = Br
16,2		27,6		10,0		X = I