

NMR spektra fosforu

Poznání významné role fosfátů v důležitých biochemických pochodech a stoupající význam anorganických polymerů obsahujících fosfor stimuluje zájem o fosforová NMR spektra.

V přírodě se vyskytuje jediný izotop fosforu ^{31}P se spinem $I = 1/2$. Přijatelná citlivost a 100% izotopové zastoupení umožňují měřit ^{31}P NMR spektra i v nízkých koncentracích.

Chemické posuny (referencované externě vůči 85% kyselině fosforečné umístěné v zatavené kapiláře) zaujímají rozsah kolem 700 ppm. Je třeba upozornit, že starší literatura (do 70. let minulého století) obsahuje data s opačnou definicí znamének.

Anorganické látky

mol.:	H_3PO_4	P_4	PH_3	PCl_3	PF_3	PF_6^-	PN	$\text{P}(\text{CN})_3$
δ :	0(standard)	-552	-266	+217	+98	-145	+275	-136

Uhlovodíky a deriváty

mol.:	PH_2Me	PH_2Et	$\text{PH}_2(n\text{-Bu})$	$\text{PH}_2(t\text{-Bu})$	PH_2Cy
δ :	-163	-128	-140	-82	+110

mol.:	PHMe_2	PHEt_2	$\text{PH}(n\text{-Bu})_2$
δ :	-100	-51	-66

mol.:	PMe_3	PEt_3	$\text{P}(n\text{-Bu})_3$	$\text{P}(t\text{-Bu})_3$	PCy_3
δ :	-62	-20	-31	+61	+7

mol.:	PMeF_2	PMeCl_2	PMeBr_2
δ :	+245	+192	+184

mol.:	PMe_2F	PMe_2Cl	PMe_2Br
δ :	+186	-97	-91

mol.:	$\text{P}(\text{OMe})_3$	$\text{P}(\text{OEt})_3$	$\text{P}(\text{OPh})_3$
δ :	+140	+140	+129

Aromáty

mol.:	PH_2Ph	$\text{PH}_2(p\text{-tol})$	$\text{PH}_2(o\text{-tol})$	$\text{PH}_2(m\text{-tol})$	PH_2Bz	$\text{PH}_2(\text{C}_6\text{F}_5)$
δ :	-119	-125	-131		-121	-183

mol.:	PHPh_2	$\text{PH}(p\text{-tol})_2$	$\text{PH}(o\text{-tol})_2$	$\text{PH}(m\text{-tol})_2$	$\text{PH}(\text{C}_6\text{F}_5)_2$
δ :	-41	-43	-59	-40	-143

mol.:	PPh_3	$\text{P}(p\text{-tol})_3$	$\text{P}(o\text{-tol})_3$	$\text{P}(m\text{-tol})_3$	PBz_3	$\text{P}(\text{C}_6\text{F}_5)_3$
δ :	-5	-8	-31	-6	-10	-76

Fosfinoxydy

mol.: OPMe_3 OP(OMe)_3
 δ : +36 +3

Fosfoniové soli

mol.: PH_4^+ PMe_4^+
 δ : +105 +25

Zkratky:

Bu buthyl
Bz benzyl
Cy cyklohexyl
Et ethyl
Me methyl
Ph fenyl
tol toluyl

Reference:

C. van Wüllen, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2000**, 2, 2137.

R. Bosque, J. Sales, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **2001**, 41, 225.

R. M. Silverstein, F. X. Webster, D. J. Kiemle, *Spectrometric identification of organic compounds*, Wiley, Hoboken, **2005**.