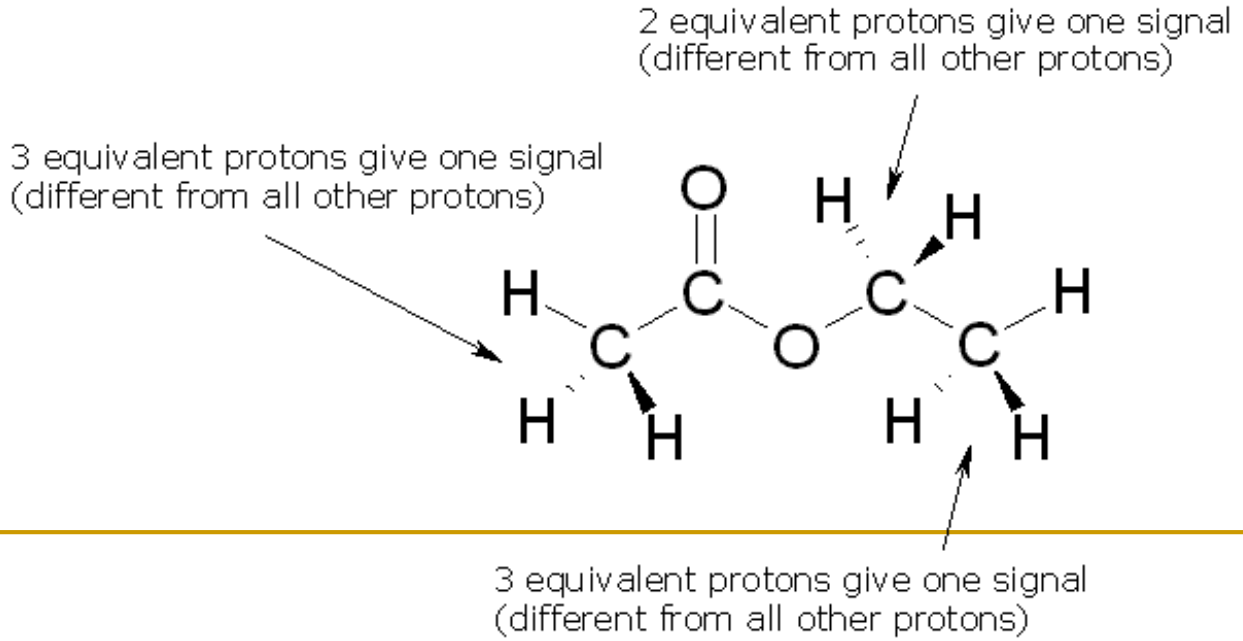
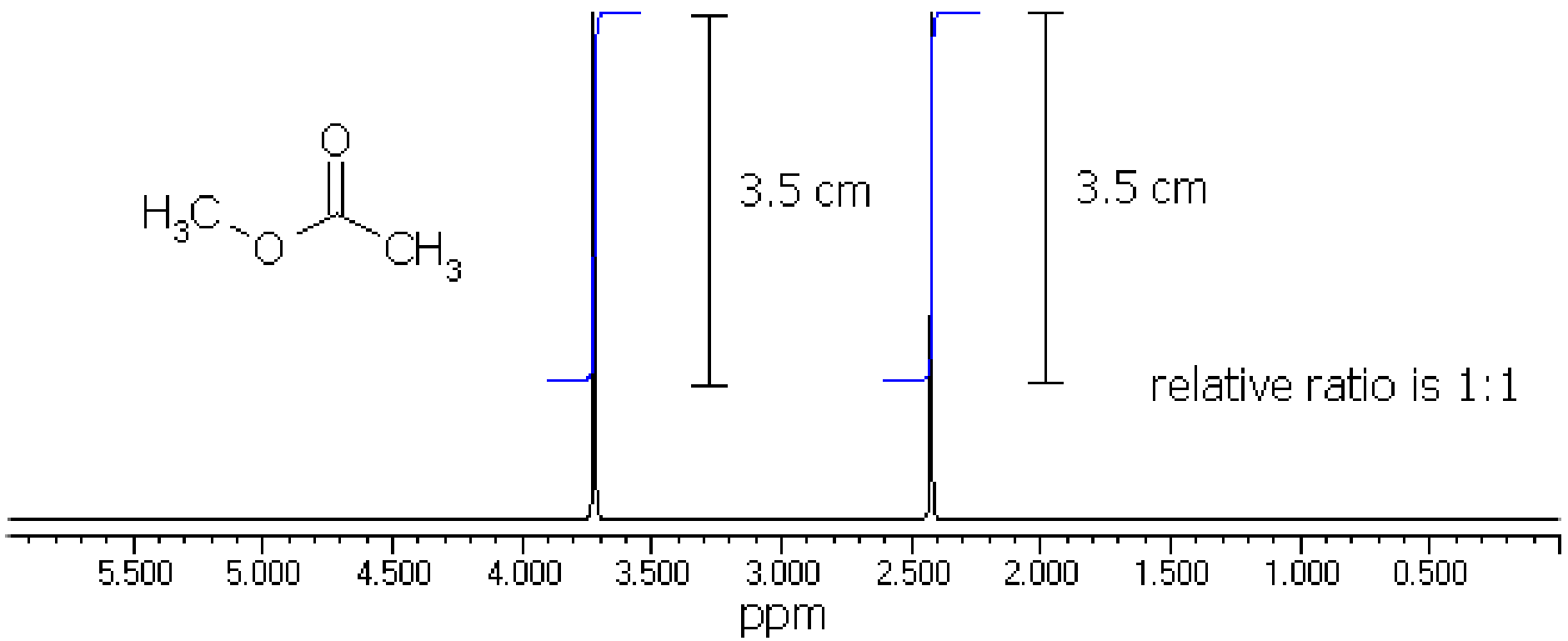
NMR

المعلومات التي يمكن ان نحصل عليها من طيف NMR

- 1) التشابه الكيميائي
- وجد ان كل البروتونات في الظروف الكيميائية المتشابهة فانها كيميائيا (كذلك مغناطيسيا) متماثلة . هذه البروتونات المتماثلة كيميائيا سوف يحدث لها الرنين عند نفس الإنزياح الكيميائي . اي ان البروتونات المتكافئة كيميائيا متكافئة في الإنزياح الكيميائي
- في هذه الحالة فان طيف NMR سيخبرنا بعدد وانواع البروتونات المختلفة في المركب . الشكل التالي يمثل انواع البروتونات المتساوية في ايثايل اسيتات .



- تظهر في كل طيف اشارة صغيرة عند δ= صفر ج م م وهذه ناتجة من مركب استخدم في الجهاز للمعايرة .
- واول علاقة هي بين عدد الإشارات في الطيف وانواع الهيدروجين المختلفة في المركب .
- والعلاقة الإخرى التي نود ان نجدها من الطيف هي النسبة بين قيمتي الإشارتين لأن المهم هنا ليس ارتفاع الإشارات وانما المساحة الواقعة تحتها . فهذه المساحة تحسب اوتوماتيكيا وتكون نسبها كأعداد الهيدروجين في الإشارات المختلفة . في الشكل النسب العددية للبروتونات لكل اشارة في ميثايل اسيتات .


H3C
O
O
CH3
3.5 cm
3.5 cm
relative ratio is 1:1
5.500
5.000
4.500
4.000
3.500
3.000
2.500
2.000
1.500
1.000
0.500
ppm

الإنزياح الكيميائي للمجموعات الوظيفية

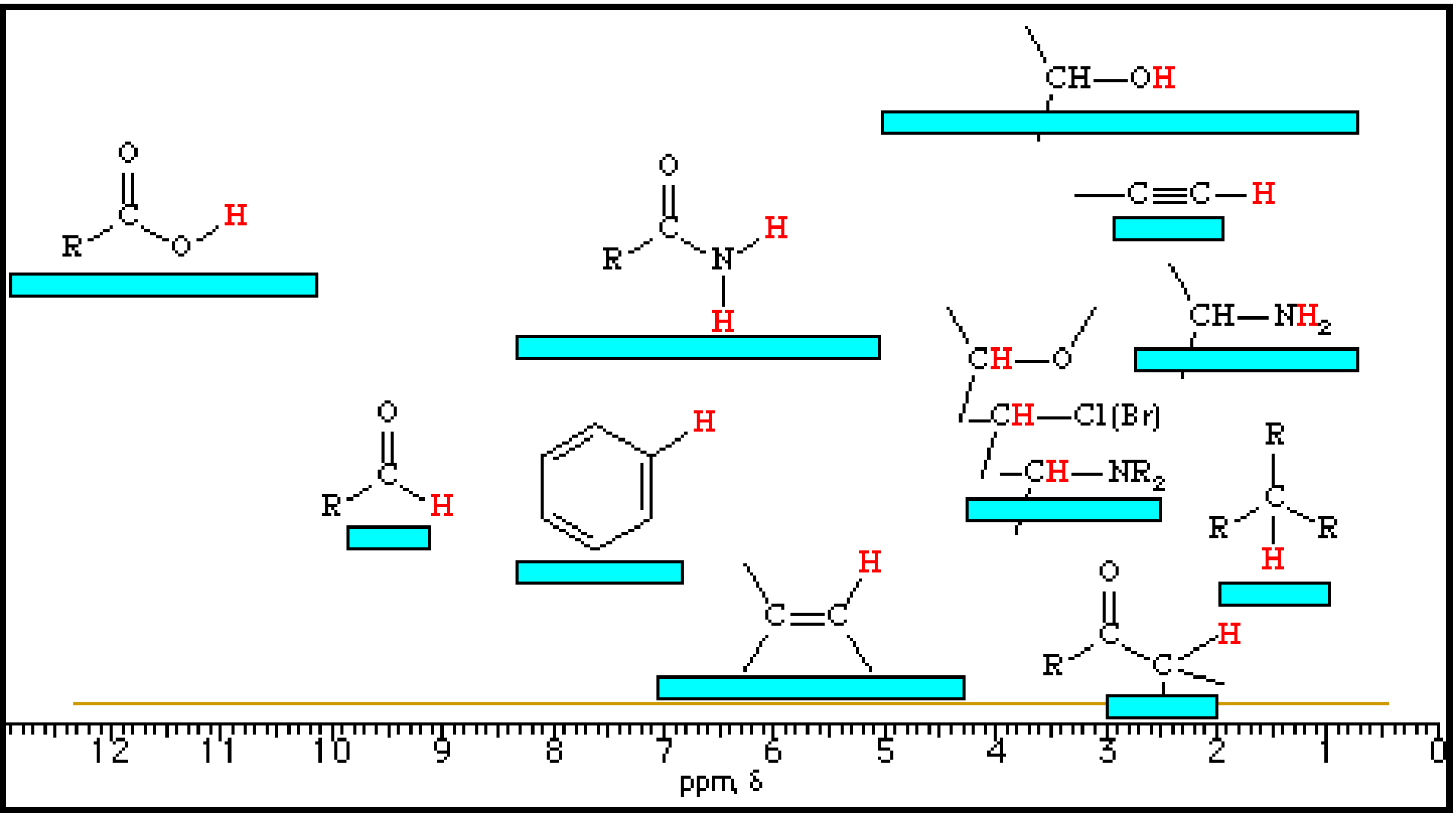
- هي المكان الذي يحدث فيه الرنين للبروتون او مجموعة من البروتونات بالنسبة الى المركب المرجع وهو TMS
- وتم اختيار هذا المرجع بسبب وجود 12 هيدروجين حيث ان كمية صغيرة منه كافية لإعطاء اشارة قوية نسبيا .وحيث ان ذرات الهيدروجين جميعها متكافئة فانه يعطي اشارة واحدة فقط . وبسبب انخفاض سالبية السيليكون عن الكربون فان بروتوناته تقع في مناطق ذات كثافة الكترونية عالية اس انها محجوبة . وتمتص في منطقة من الطيف لايمتص عندها الا عدد قليل جدا من البروتونات .وهو خامل . ومتطاير .
- ويقاس الإنزياح الكيميائي بالـهرتز (Hz) وتسمى دلتا δ وتقاس بقسمة قيمة الإنزياح الملاحظ بالطيف بوحدات هرتز على التردد المستخدم في الجهاز بوحدات الهيرتز مضروبا بوحدات ج م م (10^6)
- والطيف كذلك يمكن ان يساعدنا بالتعرف على المجموعات الوظيفية في المركب من العلاقة التكاملية للأطيف المختلفة .

- δ = shift in(Hz) / (spectrometer frequency in MHz

مثال بورمو ايثان وقيم الإزاحة لمجالين مغناطيسيين مختلفين

Strength of Field:	B_0=1.41 Tesla	B_0=1.41 Tesla
Operating Frequency:	60 MHz	100 MHz
Shift From TMS:	162 Hz	270 Hz
d value:	2.7 ppm	2.7 ppm

جدول الإنزياح الكيميائي للطيف النووي الرنيني للهيدروجين

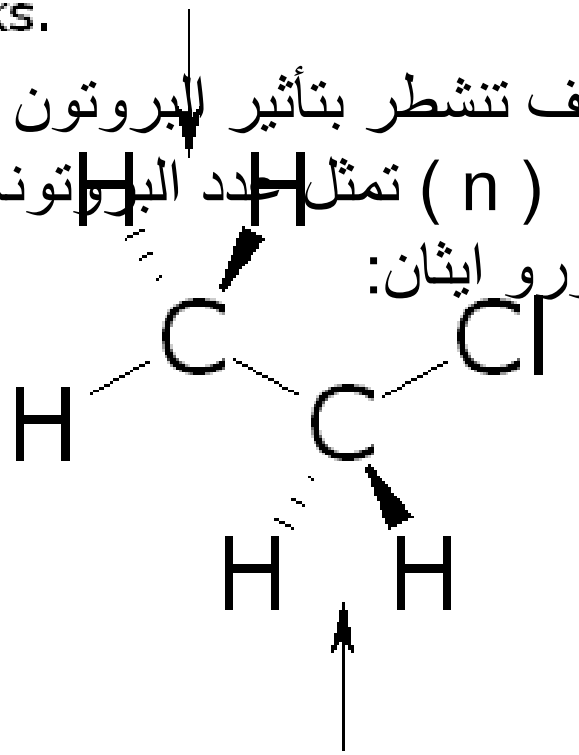


انشطار إشارات الإمتصاص وقاعدة (n+1)

- These 3 protons are adjacent to a carbon with 2 hydrogens. Therefore, the peak for these protons will be split into n+1, or 2+1=3, peaks.

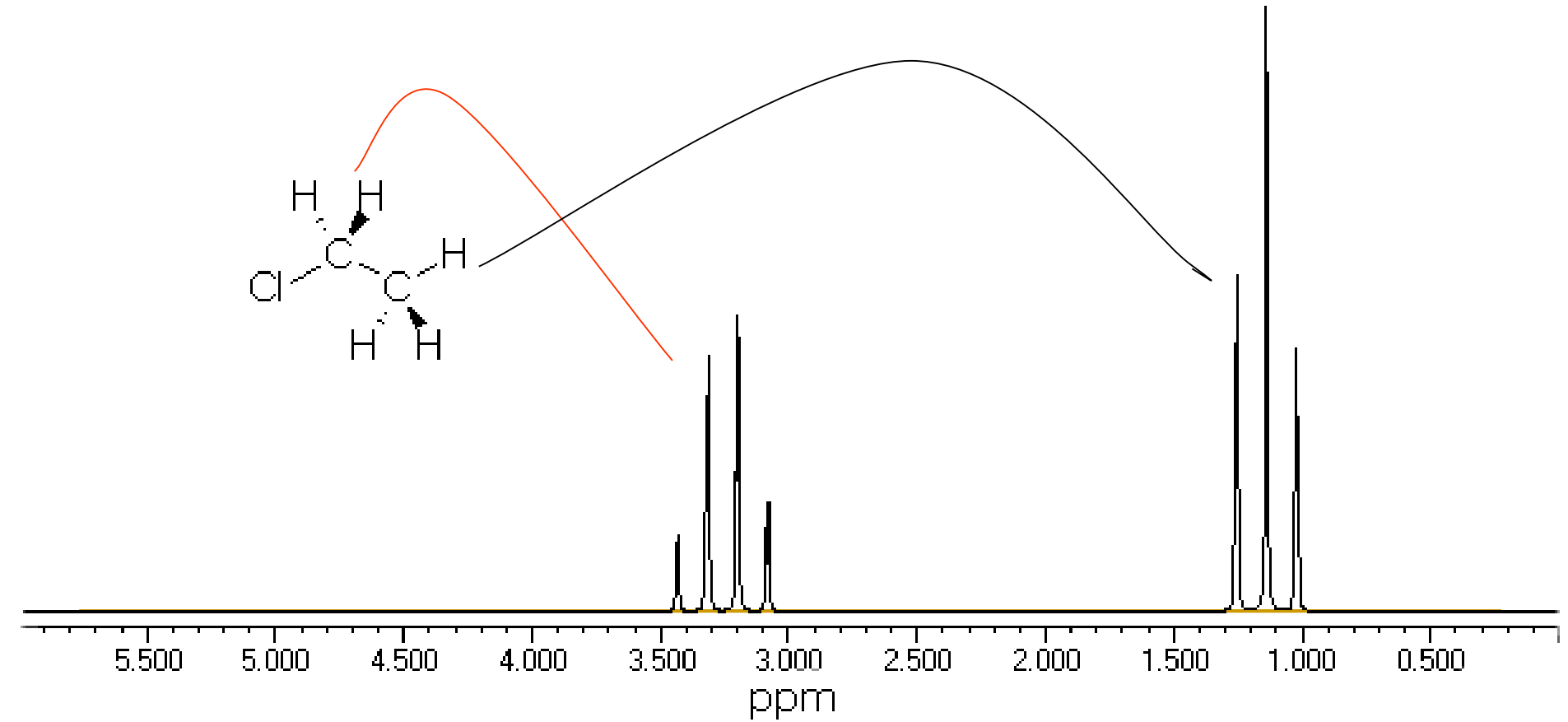
البروتونات على ذرة الكربون تشعر بتأثير البروتونات الأخرى على ذرة كربون أخرى مجاورة .

- الإشارة لبروتون معين سوف تنشطر بتأثير البروتون على ذرة الكربون الأخرى الى n+1 اشارة (n) تمثل عدد البروتونات المجاورة . الشكل التالي يبين ذلك لمركب كلورو ايثان:



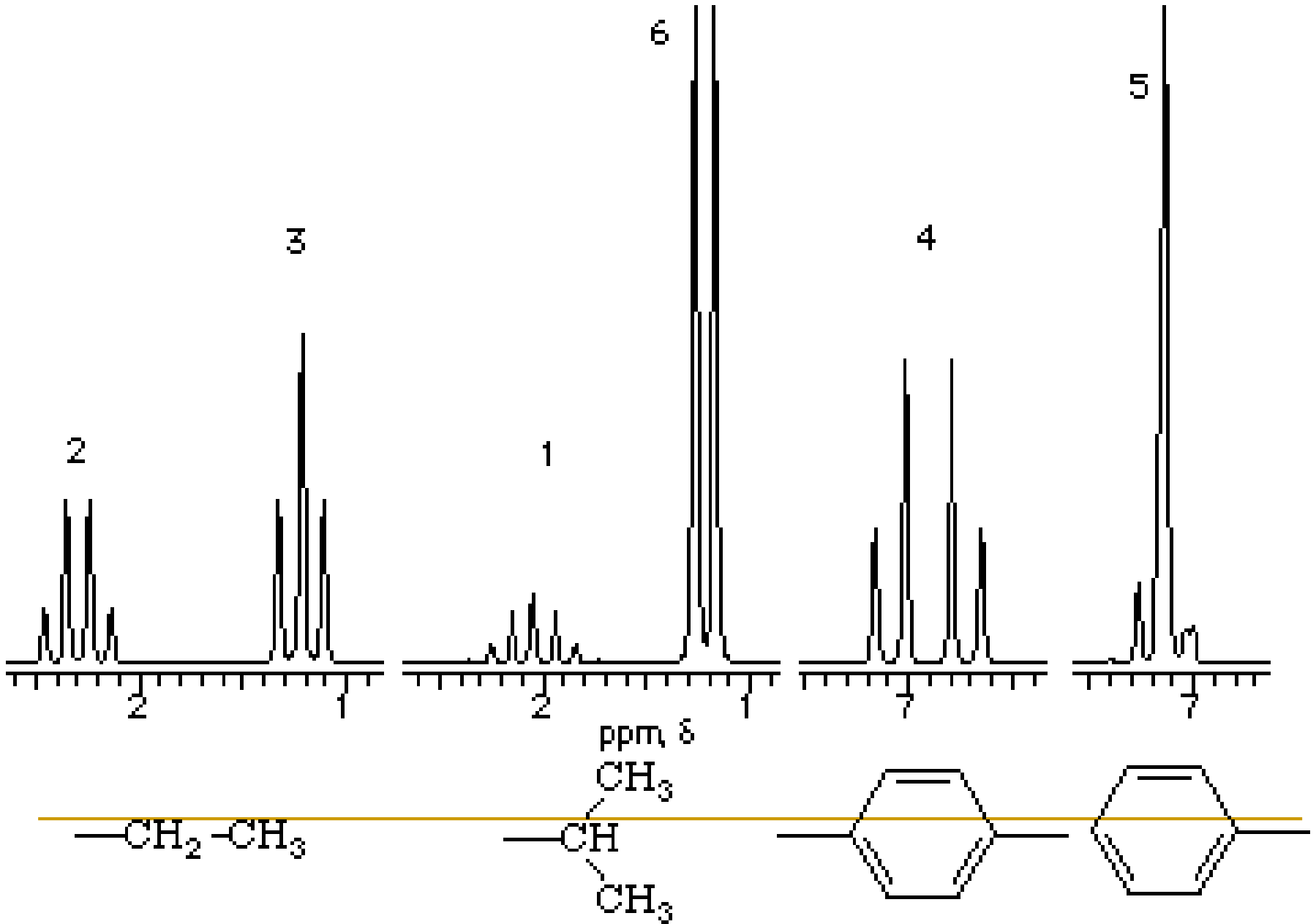
These 2 protons are adjacent to a carbon with 3 hydrogens. Therefore, the peak for these protons will be split into n+1, or 3+1=4, peaks.

- الشكل التالي يمثل طيف NMR لكلورواثان . لاحظ وجود اشارتان لنوعين من البروتون . كل نوع انشطر بحسب عدد البروتونات المجاورة له .

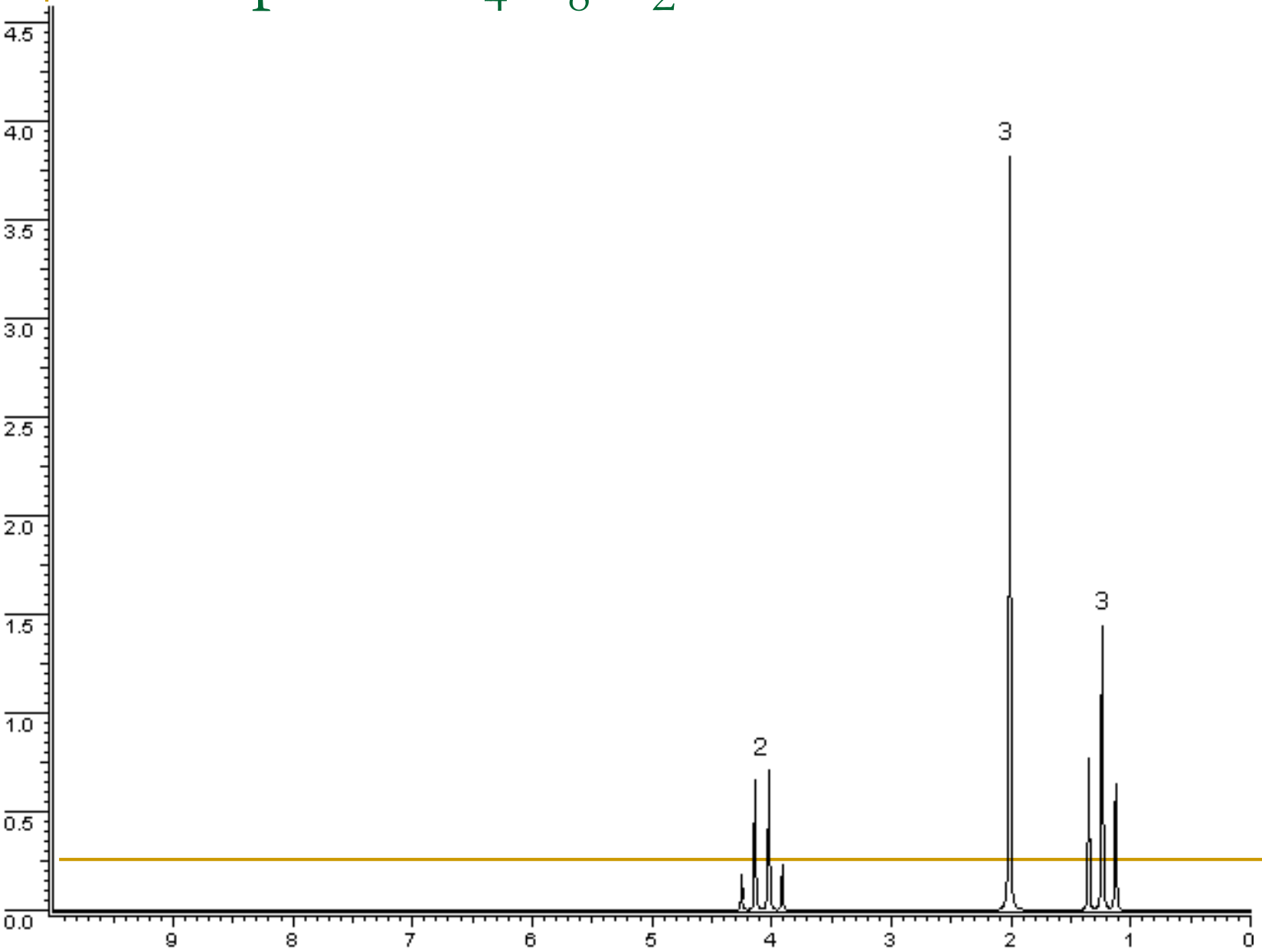


ملاحظة مهمة

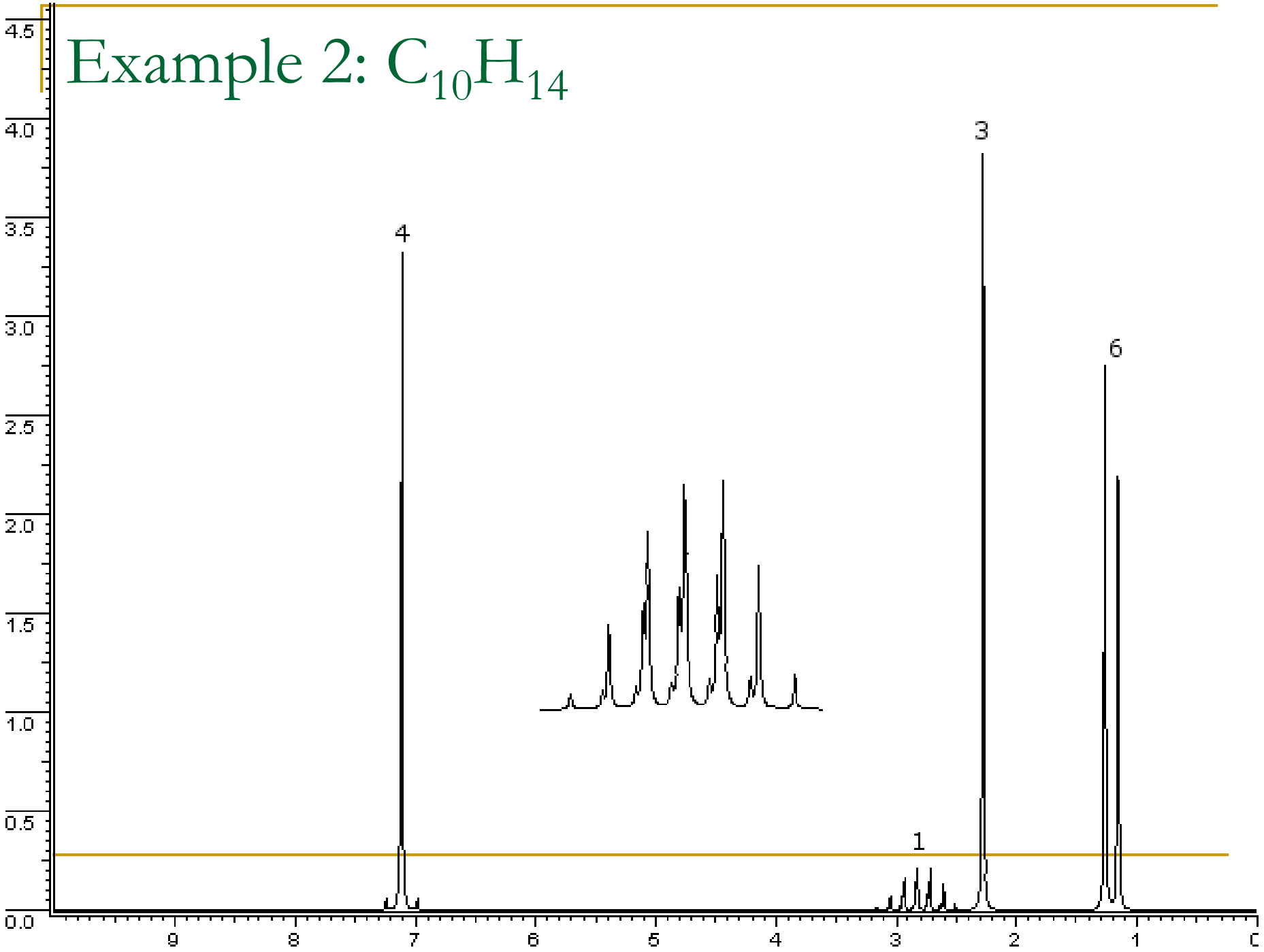
- الهيدروجينات المرتبطة بالأوكسيجين (الكحولات) والنيتروجين (الأمينات) لا تنشطر الإشارات بفعل الهيدروجينات المجاورة .
- الإنشطار الخاص بالحلقة الأروماتية .
- حلقة ذات بديل واحد :تعطي اشارة واحدة فقط او متعددة .
- اورثو وميتا تعطي اشارة متعددة .
- بارا تعطي اشارتين(d,2H; d,2H) وتسمى ثنائية الثنائية .


6
5
3
4
2
1
2
1
2
1
7
7
ppm, δ
CH3
CH2 CH3
CH
CH3

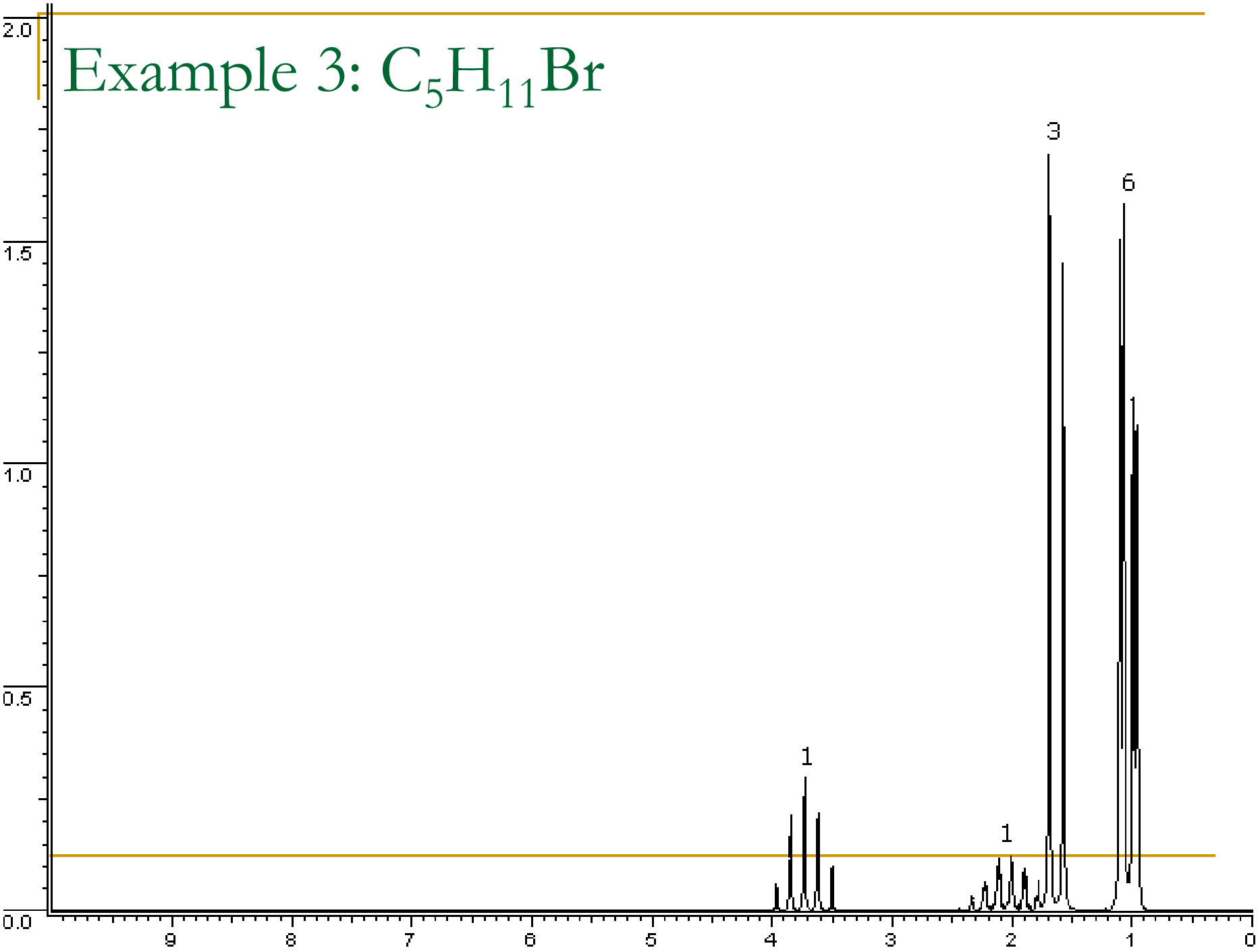
Example 1: $C_4H_8O_2$



Example 2: $C_{10}H_{14}$



Example 3: $C_5H_{11}Br$



Example 4: $C_{10}H_{12}O_2$