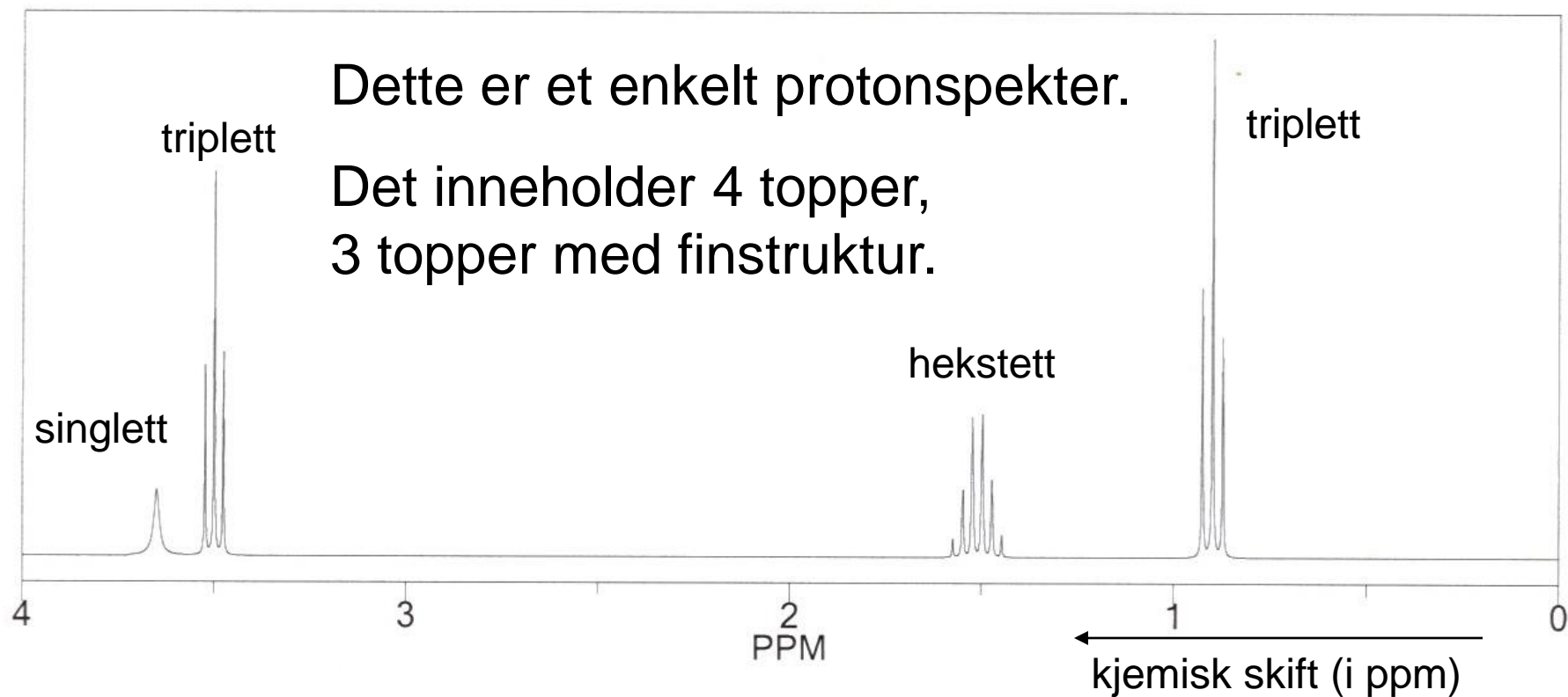


Å tolke enkle ^1H -NMR-spektre (protonspektre)



Bjørn Pedersen
Kjemisk institutt, UiO

Topp-posisjon (kjemisk skift)

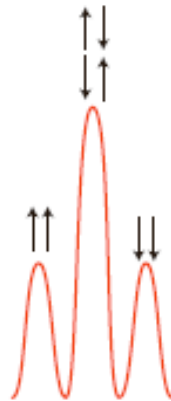
Tabell over kjemisk skift for ulike typer protoner

Type protoner	Kjemisk skift i ppm	Type protoner	Kjemisk skift i ppm
R-CH ₃	0,8-1,5	CH ₃ -O-	3,5-4,0
R-CH ₂ -CH ₃	1,2-1,4	R-O-H	1 - 5
CH ₃ -COOR	2,0-2,6	-HC=C	5-6
R-CH ₂ -COR	2,1-2,6	C ₆ H ₅ -	6,6-8,0
C ₆ H ₅ -CH ₃	2,2-2,5	-CHO	9,5-9,8
R-CH ₂ -O /Cl	3-4	R-COOH	10-13

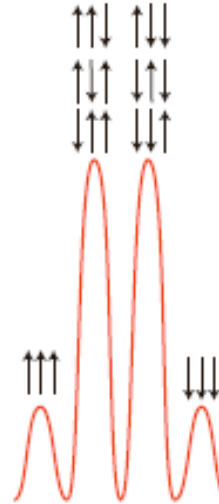
Finstruktur

n + 1 regelen:

Med n ^1H -atomer i nabogruppen(e), splitter toppen opp i (n+1)-topper som er binominalt fordelt.



Triplett fra kobling til en CH_2 -gruppe

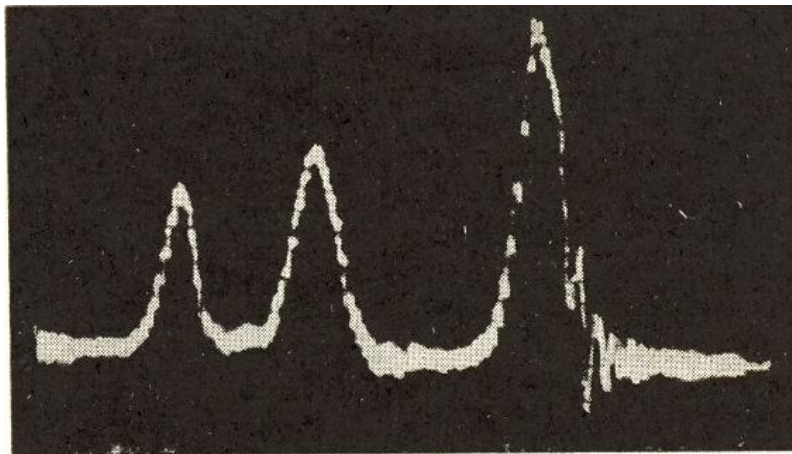


Kvartett fra kobling til en CH_3 -gruppe

Tolkningsregler

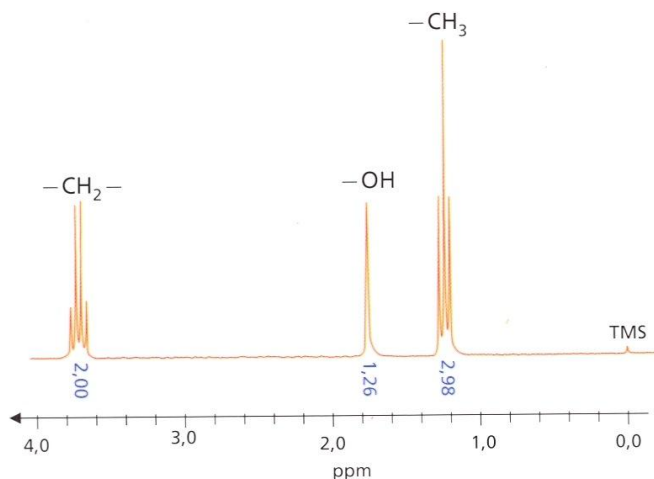
1. Enkelt vil si at det kjemiske skiftet er stort i forhold til finstrukturen.
 - Kobling mellom ^1H -atomer som har *samme* kjemiske skift gir ikke finstruktur.
 - Antall topper i spektret forteller hvor mange grupper ^1H -atomene er fordelt på i molekylet.
 - Arealet under hver topp forteller hvor mange ^1H -atomer som bidrar til toppen.
 - Det kjemiske skiftet forteller hvilken gruppe det er. Elektronegative substituenten øker skiftet.
 - Finstrukturen gir antall nabo- ^1H -atomer (n) fra (n+1)-regelen.

Protonspektret av etanol



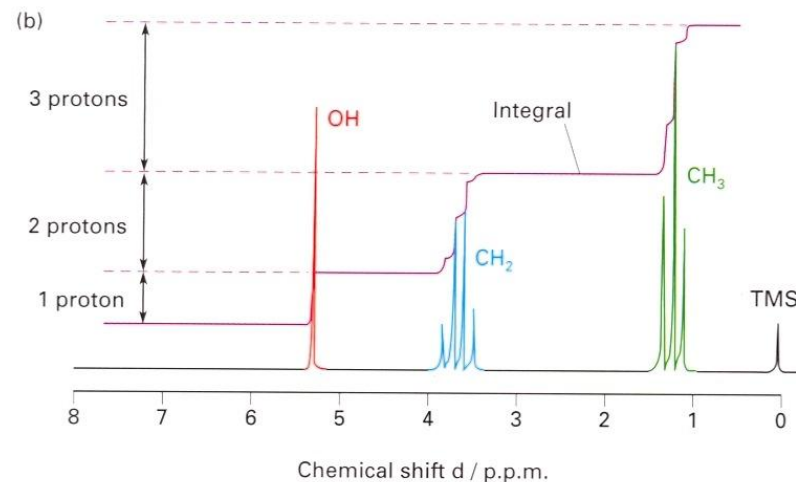
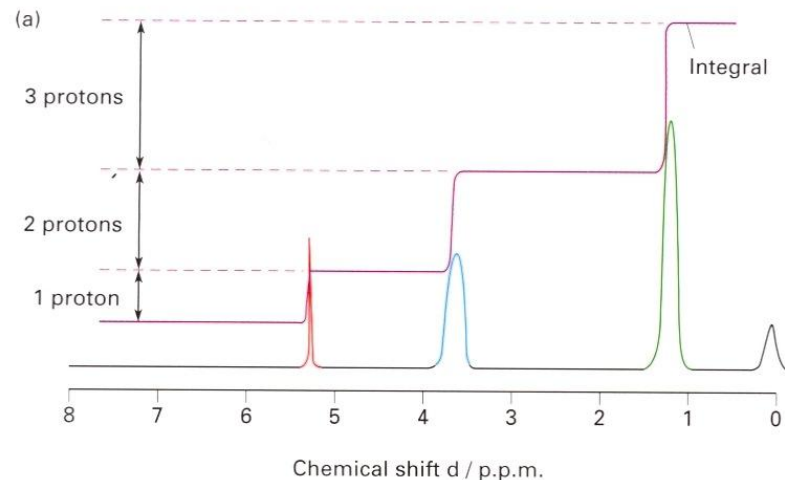
Arnold, Dharmati, Packard, *J. Chem. Phys.* **19**(1951)507.

Et enkelt ^1H -NMR-spekter av etanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, slik det så ut i 1950.



^1H -NMR-spekter av etanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ (løst i DCCl_3) tatt opp ved Universitetet i Oslo i 2008. De blå tallene viser relative arealer under hver gruppe av topper.

Fra Clugston & Flemming: *Advanced Chemistry*. Oxford (2000):



The NMR spectrum of ethanol (a) at low resolution and (b) at high resolution. The additional trace with vertically rising sections 'integrates' the area under each peak. The height of each vertical section is proportional to the area under the peak.

Hvilken H_nC -gruppe gir hvilken topp i 1H -spekteret?

1 3
 2 4

1 2 3 4

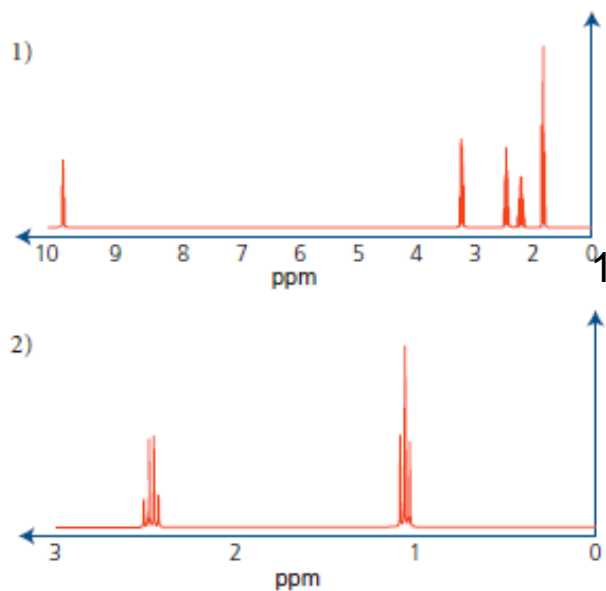
- a) etan b) kloretan c) 1,1-dikloretan d) 1,2-dikloretan

Hvilken forbindelse gir hvilket spekter?

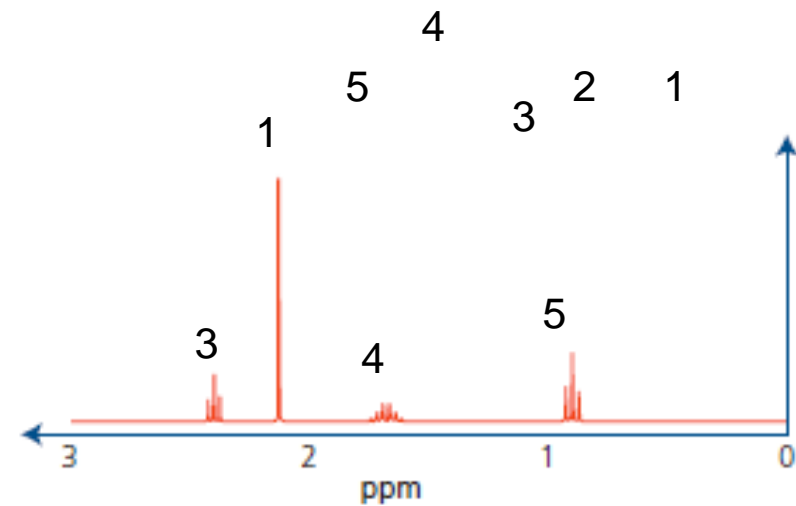
1. Singlett ved 3,7 ppm 3
2. Singlett ved 0,86 ppm

4

Eksempel side 130 og 131



Figuren viser protonspektret av et aldehyd (1) og protonspektret av et keton (2) med molekylformel $C_5H_{10}O$.

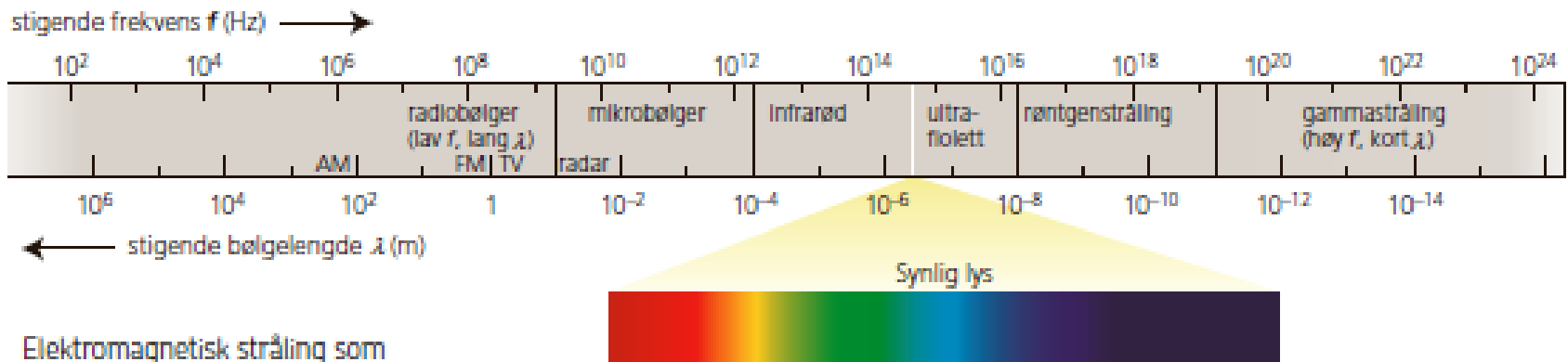


Protonspekter av pentan-2-on.

Kjært barn ..

- NMR - nuclear magnetic resonance
 - kjernemagnetisk resonans
 - radiospektroskopi
- Spinnspektroskopi
 - Kjernespinnspektroskopi
 - Elektronspinnpektroskopi
- MR - magnetisk resonans
 - Magnet-resonans-tomografi
 - MRI Magnetic resonance imaging

Det elektromagnetiske spektrum



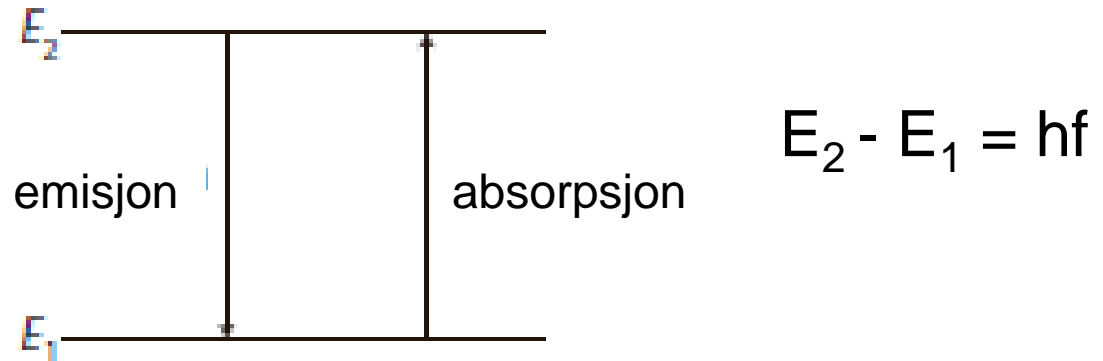
Elektromagnetisk stråling som funksjon av frekvens og bølgelengde. $f = \frac{c}{\lambda}$ der c er lyshastigheten. SI-enheten for frekvens er $\text{Hz} = \frac{1}{\text{s}}$.

f – frekvens (i $\text{Hz} = 1/\text{s}$)

λ - bølgelengde (i m)

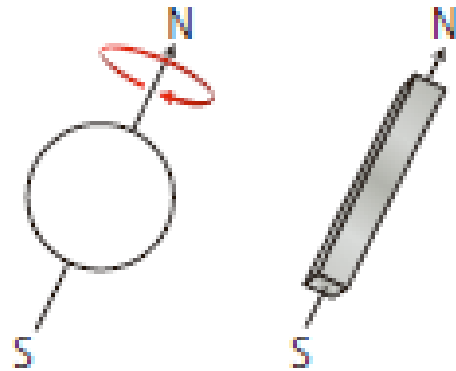
C er lyshastigheten (i m/s)

Basis spektroskopi



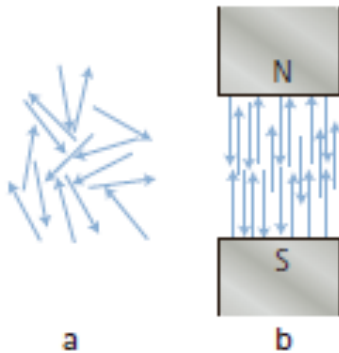
Energioverganger når elektromagnetisk stråling absorberes eller emitteres fra en prøve.

Magnetisk dipolmoment

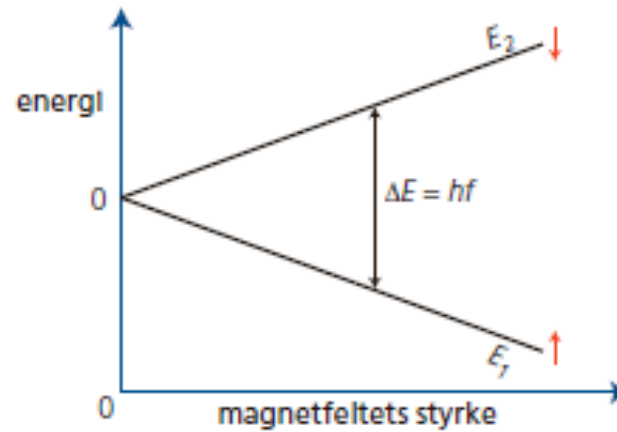


Et proton spinner om en akse og er en magnetisk dipol.

Kjernespin i magnetfelt

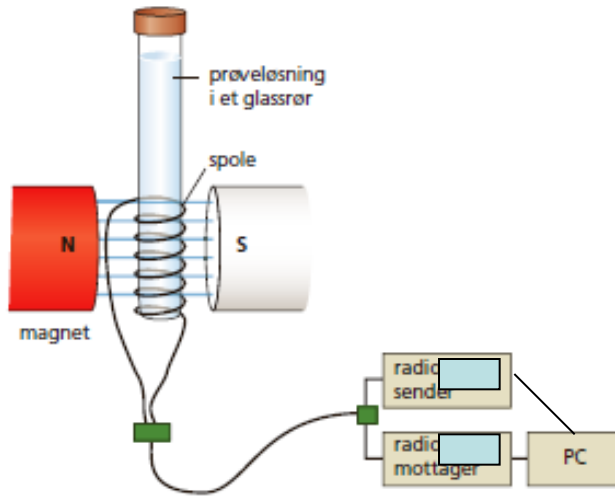


- a) Protonene er uordnet utenfor et magnetfelt.
- b) Protonene er ordnet i et magnetfelt.



De to energinivåene for magnetiske dipoler som funksjon av magnetfeltets styrke. Dipolene er enten orientert med magnetfeltet (\uparrow) eller mot magnetfeltet (\downarrow).

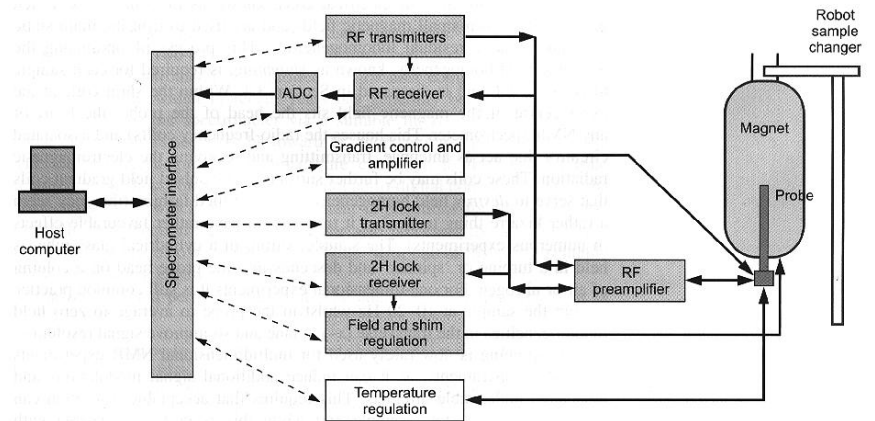
Prinsippskisse av et NMR-spektrometer



NMR-spektrometer vist skjematisk. Et NMR-spektrometer har en magnet med et permanent magnetfelt. Spektrometret har også en radiosender, mottager og PC

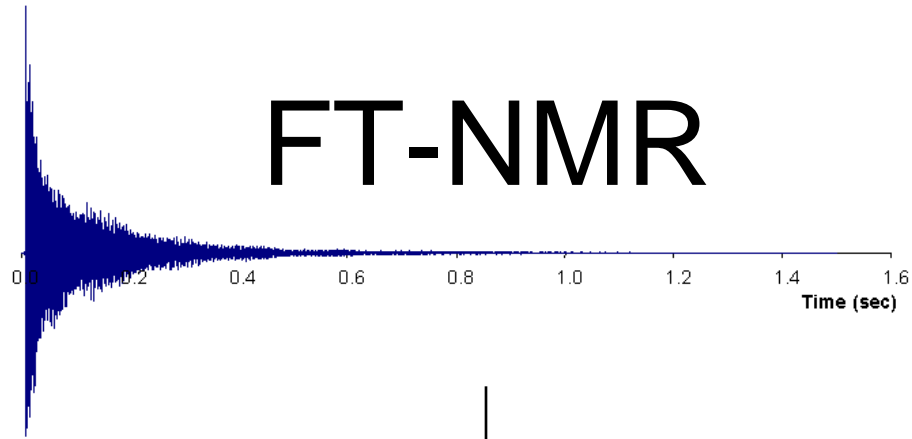


Et moderne 1 GHz-spektrometer

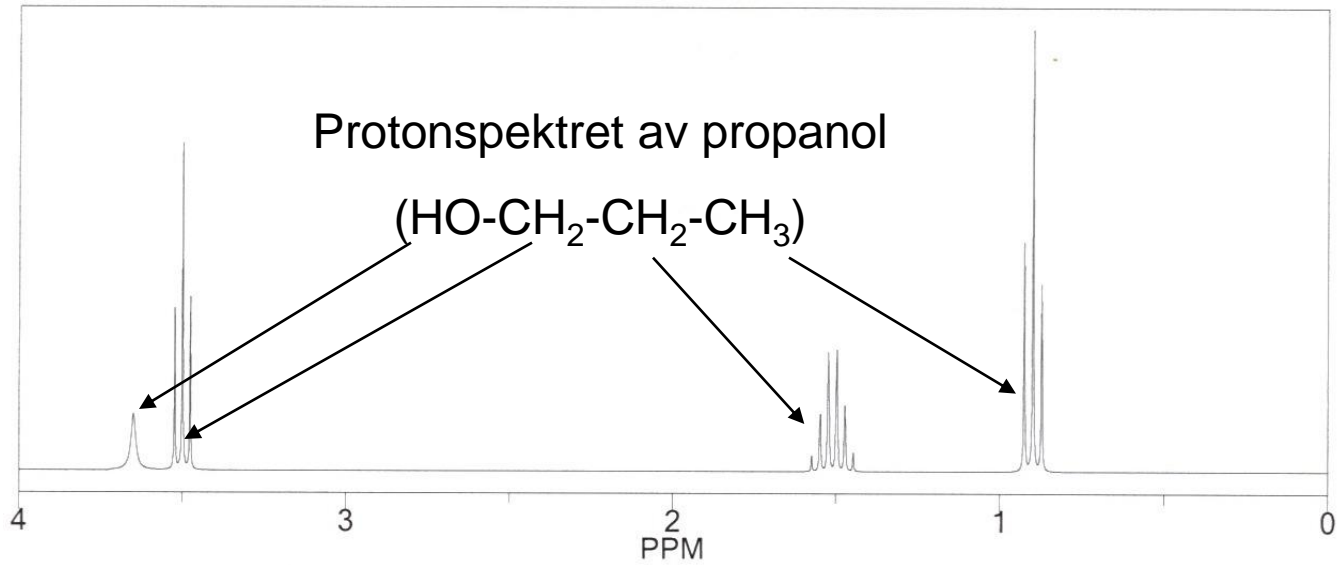


Et moderne NMR-spektrometer vist skjematisk

FT-NMR



↓ FT



Les mer:

- Kapittel 6 "Separasjon og instrumentell analyse av organiske stoffer" i *Kjemien stemmer* Kjemi 2 grunnbok.
 - 6.4 NMR-spektroskopi side 125-130.
- Oppgaver er gitt i studieboken side 106-7.
- Rettelser og kommentarer til boken er gitt på:
<http://kjemienstemmer.cappelen.no/>.
- Figurene i boken kan klippes der i fra ved å bruke Adobe Reader versjon 9.1
- En fyldigere fremstilling av NMR enn i *Kjemien stemmer*:
 - [http://www.snl.no/kjernemagnetisk_resonans_\(NMR\)](http://www.snl.no/kjernemagnetisk_resonans_(NMR))