

Spektroskopie 2

Hochauflösende NMR-Spektroskopie von ^1H und ^{13}C

D. S. Stephenson und C. Dubler
Department Chemie, Universität München

Nuclear Magnetic Resonance

Inhalt

Kernmagnetismus und Magnetfelder Was tut ein Kern in einem Magnetfeld?

Chemische Verschiebung Warum die Signale mal rechts mal links im Spektrum sind.

Spin-Spin Kopplung Warum die Signale oftmals aufgespalten sind.

Empirische Regeln zur Bestimmung der Verschiebung Wie man voraussagen kann, bei welcher Verschiebung ein Signal kommt.

Spin-Entkopplung Die Entfernung der Spin-Spin-Kopplung.

Zuordnung von ^{13}C -Signalen Gehört das Signal zur CH_3 -Gruppe oder zur CH_2 -Gruppe?

Spin-Systeme Sind die Kerne gleich oder nicht? Wieviele Signale hat ein Molekül?

Meßmethoden I Wie das Spektrum gemessen wird.

Korrelationen zwischen Kernen (2D-Spektren) Wie die Interpretation einfacher wird, wenn man kompliziertere Experimente durchführt.

Relaxation Rückkehr zum Gleichgewicht.

Meßmethoden II Probenvorbereitung.

Literatur

- Bücher
 1. Manfred Hesse, Herbert Meier, Bernd Zeeh, Spektroskopische Methoden in der organischen Chemie, Thieme.
 2. Horst Friebolin, Ein- Und Zweidimensionale NMR-Spektroskopie, Wiley-VCH.
 3. Harald Günther, NMR-Spektroskopie, Thieme.
 4. Robin Harris, Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, Pitman.
 5. Jeremy Sanders, Brian Hunter, Modern NMR Spectroscopy, OUP.
 6. Timothy Claridge, High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Pergamon.
 7. David Grant, Robin Harris (Eds), Encyclopedia of Nuclear Magnetic Resonance, Wiley.
- Zeitschriften
 1. Journal of Magnetic Resonance, Academic Press
 2. Organic Magnetic Resonance / Magnetic Resonance in Chemistry, Heyden

Nützliches

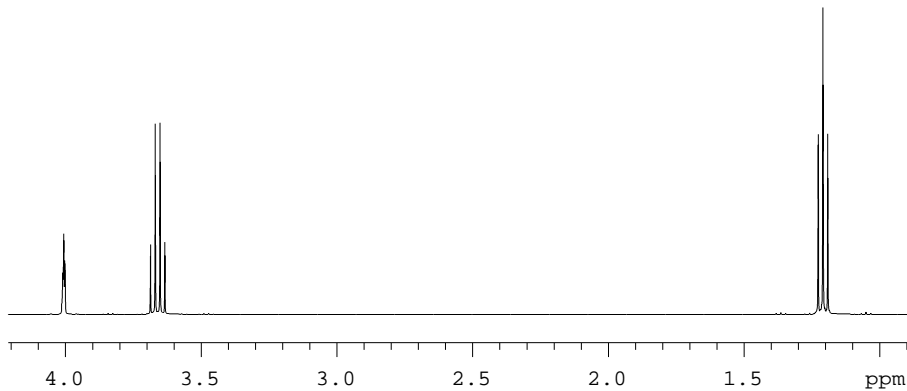
- Unsere Homepage
 1. http://cicum200.cup.uni-muenchen.de/intranet/depch/analytik/nmr_f
 - Infos zu Spektroskopie 2
 - Alte Klausuren von Spektroskopie 2
 - Ergebnisse der Klausur Spektroskopie 2
 - Skript zur Vorlesung „Spektroskopie 2: NMR-Spektroskopie“
 - Übungen zur Spektroskopie 2
 - Messmethoden in Haus F

Symbole

B_0	statisches Magnetfeld [T=Tesla]
B_{eff}	effektives Feld am Kern
δ	chemische Verschiebung bezogen auf z.B. TMS (Einheit: ppm)
γ	magnetogyrisches Verhältnis, kernspez. Konstante
I	Kernspinquantenzahl z.B. (^1H , ^{13}C , ^{19}F : $I = \frac{1}{2}$) (^2H : $I = 1$)
nJ	Kopplungskonstante über n Bindungen
ν	Frequenz [Hz]
ω	Larmor-Frequenz [rad s^{-1}]
ω_0	Einstrahlungsfrequenz [200, 300, 400, 600 MHz]
σ	Abschirmungskonstante
<hr/>	
B_1	Hochfrequenzfeld senkrecht zu B_0
E	Energie
η	Verstärkungsfaktor beim NOE-Experiment
h	Planksches Wirkungsquantum; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

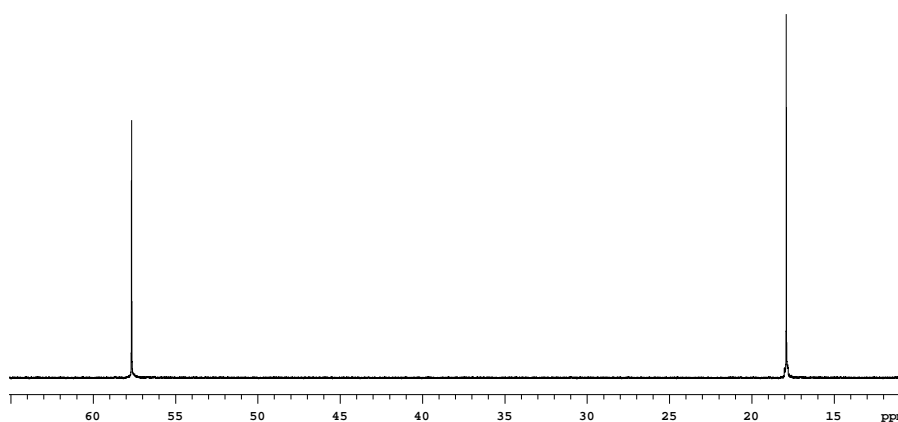
μ	magnetisches Moment
μ_z	Komponente des magnetischen Momentes in Richtung z
m	magnetische Quantenzahl
M_0	makroskopische Magnetisierung im Magnetfeld B_0
M_x, M_y	transversale Magnetisierung in x -, y -Richtung
M_z	longitudinale Magnetisierung im z -Richtung
\mathbf{P}	Eigendrehimpuls
P_z	Komponente von \mathbf{P} in z -Richtung
τ_c	Korrelationszeit der Molekülbewegung
t_1	Variable Zeit bei 2D-Experimenten; wird inkrementiert
t_2	Aufnahmezeit bei 2D-Experimente
T_1	Spin-Gitter- oder longitudinale Relaxationszeit
T_2	Spin-Spin- oder transversale Relaxationszeit

Beispiel: das ^1H -NMR-Spektrum von Ethanol



Jede Gruppe gibt je nach chemischer Umgebung *ein* Signal. Also für die drei Arten von Wasserstoff (OH, CH₂, CH₃) gibt es **drei** Signale.

Beispiel: das ^{13}C -NMR-Spektrum von Ethanol



Für die zwei Arten von Kohlenstoff (CH₂, CH₃) gibt es **zwei** Signale.