

## Kern-Magnetische Resonanzspektroskopie (NMR)

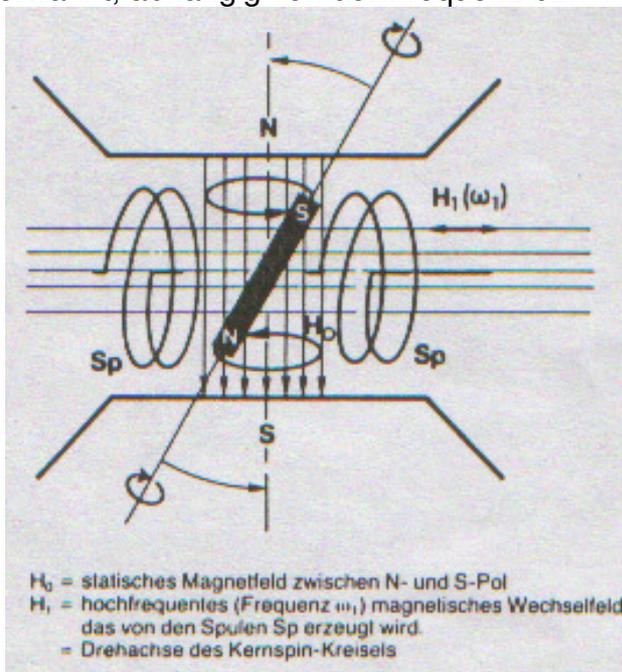
Ein Atomkern verhält sich aufgrund seiner ständigen Eigendrehung (=Kernspin) und sofern er eine elektrische Ladung auf seiner Oberfläche hat, wie ein atomar winziger Stabmagnet. Bringt man eine Substanzprobe, die eine riesige Anzahl gleicher Atomkerne enthält, in ein homogenes statisches Magnetfeld ( $B_0$ ), so werden die zuvor ungeordneten, wie Kreisel rotierenden Kernmagnetnadeln einer ordnenden Kraft ausgesetzt. Die Kerne werden in Richtung der Feldlinien ausgerichtet. Dazu werden zunächst Taumelbewegungen in Richtung der Feldlinien durchgeführt bis schließlich alle Kerne die gleiche Ausrichtung besitzen. Man bezeichnet dies auch als Präzisionsdrehung. Durch die Absorption der elektromagnetischen Strahlung (Radiowellen) kommt es zur Spinumkehr, d.h. die Magnete richten sich antiparallel zum Magnetfeld aus.

Zwei Faktoren sind dabei entscheidend:

- Jede Kernart führt bei einer bestimmten Frequenz Präzisionsbewegungen aus.
- Die Ausrichtung der Kerne ist von der Feldstärke des Magnetfeldes abhängig.

### Anwendung:

Hätte man es nun mit chemisch ungebundenen Kernen zu tun, so würde man eine einzige Resonanzlinie erhalten. Das heißt: Bei einer bestimmten Frequenz (Bedingung: konst. Feldstärke) würden die Kerne anfangen Präzisionsbewegungen auszuführen und sich antiparallel (Spinumkehr) zum Magnetfeld ausrichten. Andererseits kann man die anregende Frequenz auf die Eigenfrequenz der Kerne abgleichen (=Resonanz) und dann mit Hilfe eines 2.variablen Magnetfeldes (=magnetisches Wechselfeld) die Kerne so anregen, dass sie ebenfalls eine Spinumkehr durchführen. In beiden Fällen lässt sich die Spinumkehr durch ein Absinken der eingestrahlten Energie erkennen. Die Absorption ist, wie schon erwähnt, abhängig von der Frequenz bzw. von der Magnetfeldstärke.



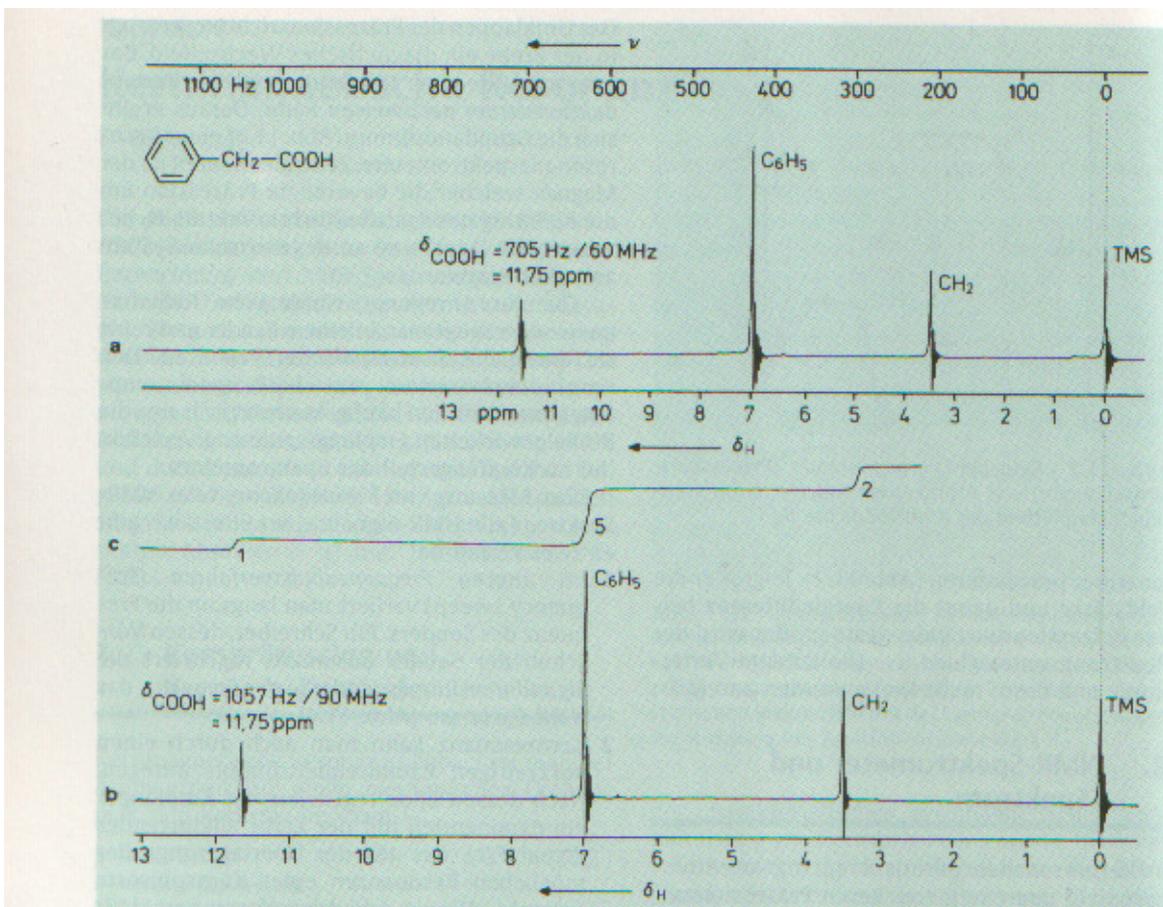
### Chemische Verschiebung:

Da die Kerne im Molekül durch andere Gruppen abgeschirmt werden, spielt die Lage des Protons eine große Rolle. Als Fixpunkt wird die Substanz Tetramethylsilan (TMS) festgelegt und willkürlich Null gesetzt.

Als Faustregel gilt : Je „entschirmt“, ein Proton ist, d.h. je elektronegativer seine unmittelbare Umgebung ist, umso größer ist die chemische Verschiebung  $\delta$ , weil das Signal dann umso weiter vom TMS entfernt ist ( $\Delta\nu$  (Frequenz) umso größer).

Beispiel:

	CH <sub>3</sub> -I	CH <sub>3</sub> -Br	CH <sub>3</sub> -Cl	CH <sub>3</sub> -F	
$\delta =$	2,15	2,69	3,06	4,27	ppm



**Abb. 11.4** <sup>1</sup>H-NMR-Spektrum der Phenyllessigsäure in Deuteriochloroform als Lösungsmittel mit Tetramethylsilan TMS als Standard. **a** Bei 1,4 T magnetischer Kraftflußdichte (60-MHz-Gerät), **b** bei 2,1 T (90-MHz-Gerät), **c** Integral des Spektrums **b**. Die Spektren **a** und **b** wurden im gleichen Frequenzmaßstab aufgezeichnet. Die Frequenzdispersion in Spektrum **b** erhöht sich im Vergleich zu **a** um 1,5, weil das Magnetfeld um diesen Faktor verstärkt wurde

## Spin-Spin Kopplung:

Die einzelnen nicht äquivalenten Protonen können sich ebenfalls gegenseitig beeinflussen. Beispiel 1,1,2-Trichlorethan:

Man erhält statt 2 Signalen (eins am  $C_1$  und eins am  $C_2$ ) 3 Signale. Je nachdem wie der Spin des benachbarten Protons vorliegt (parallel oder antiparallel) kann die Feldstärke des Magnetfeldes verstärkt bzw. geschwächt werden. Man bezeichnet dies als Spin-Spin Kopplung.

