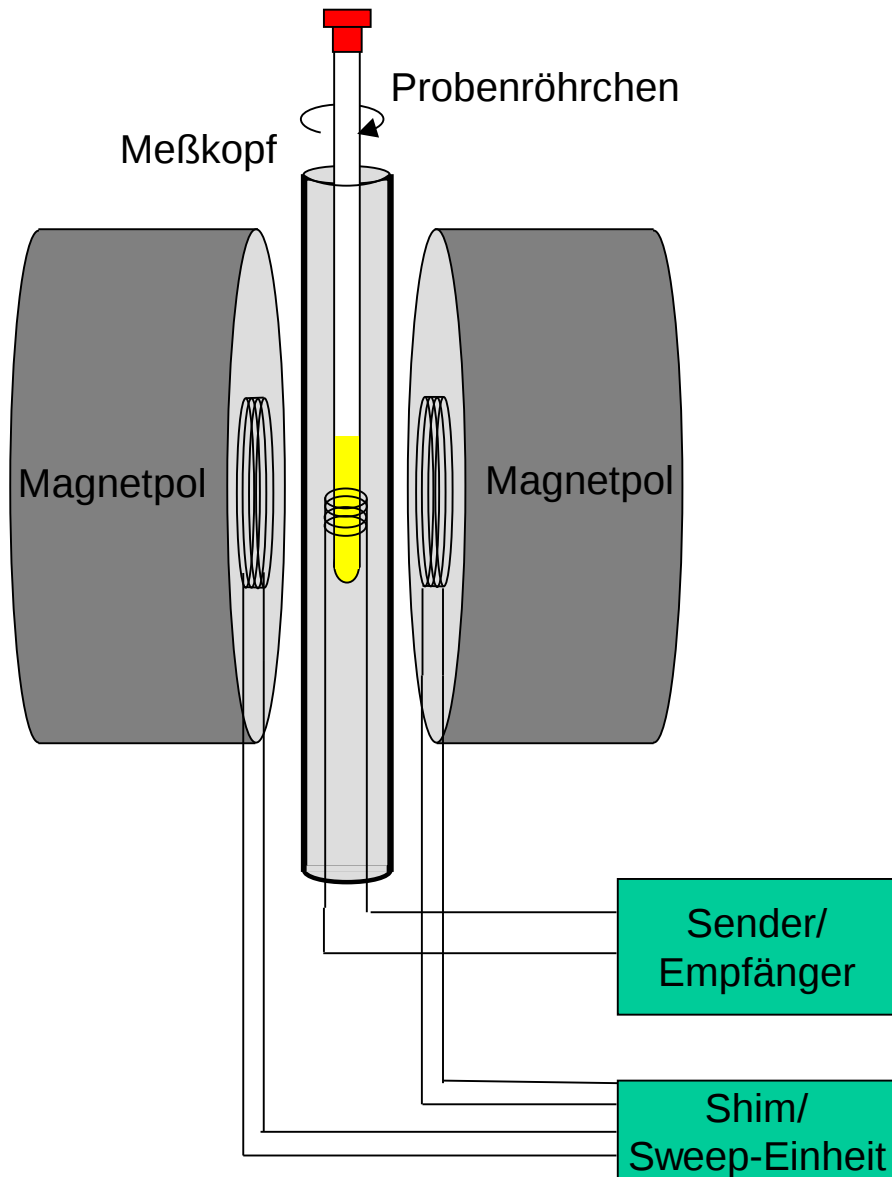
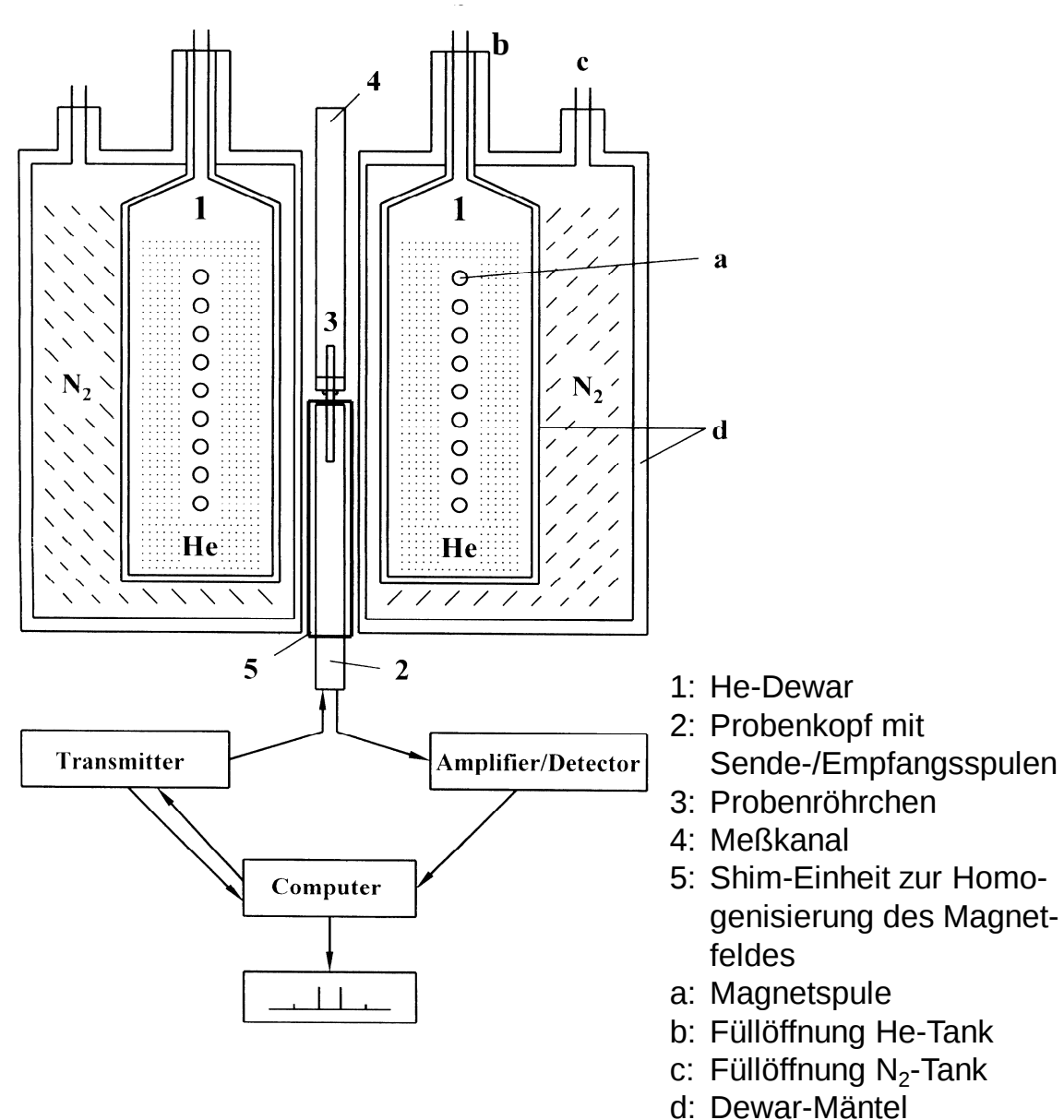


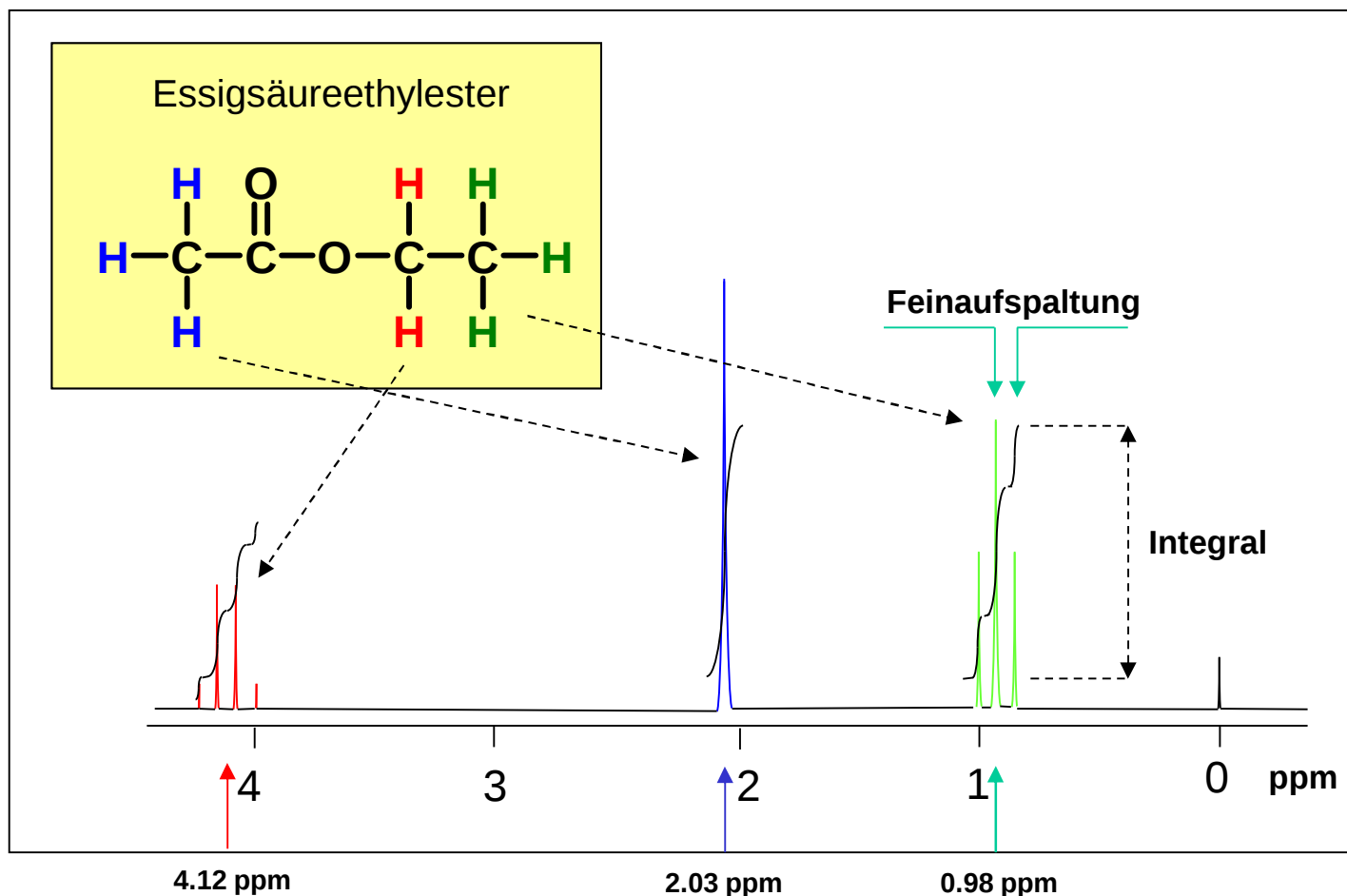
Aufbauprinzip eines NMR-Gerätes



Moderner NMR-Spektrometernaufbau mit supraleitendem Magneten



Das ^1H -NMR-Spektrum



Das NMR-Spektrum liefert Informationen über:

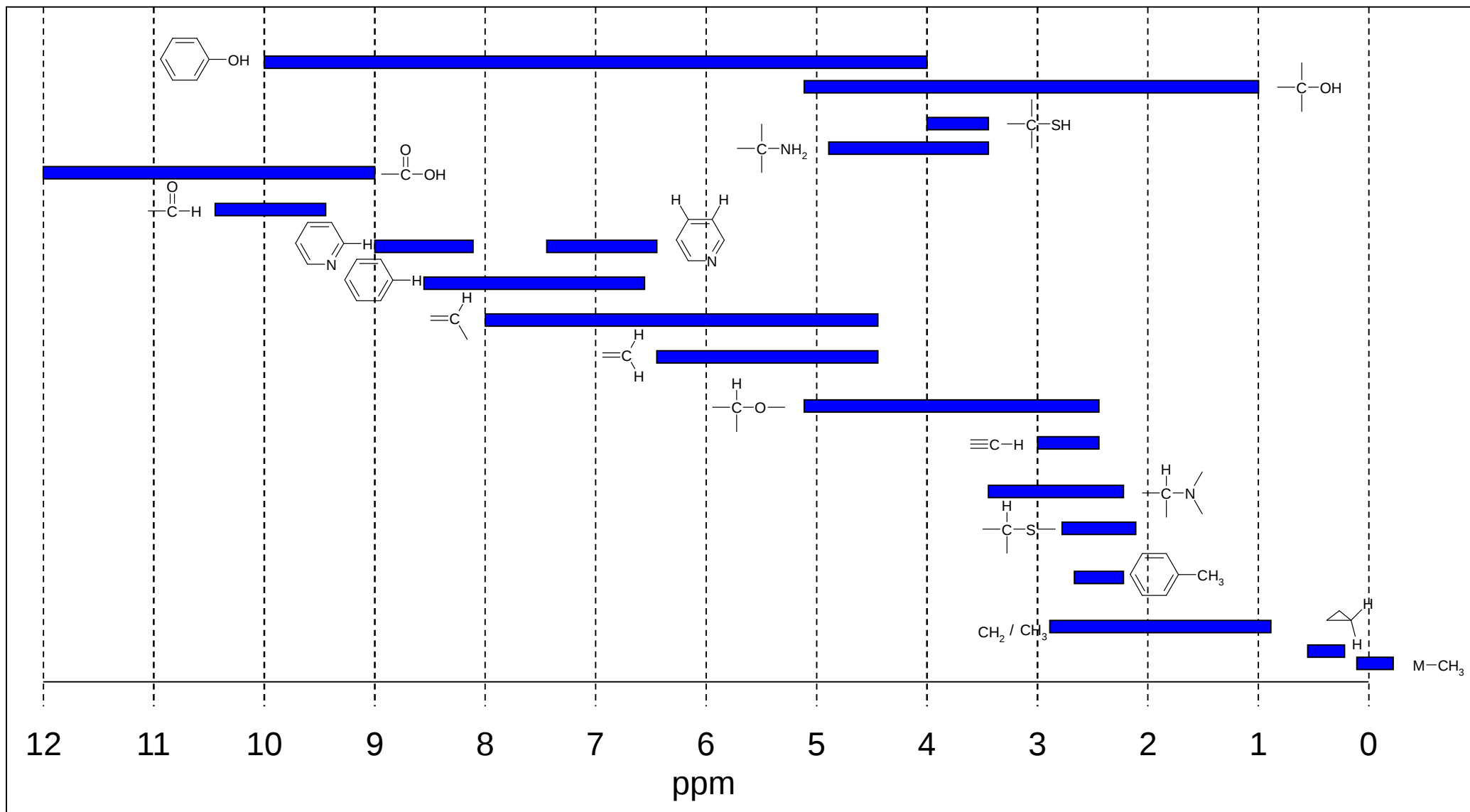
Anzahl chemisch verschiedener Kerne einer Kernsorte
(*Beispiel: 3 Sorten von Protonen*)

chemische Umgebung bzw. Bindungssituation durch chemische Verschiebung, der Lage der Resonanzen auf der ppm-Skala (*Beispiel: 1.25, 2.03 und 4.12 ppm*)

Anzahl der Protonen in der Nachbarschaft über die Signalstruktur bzw. Feinaufspaltung Signales durch Kopplungen
(*Beispiel: grün: 3 Linien, blau: 1 Linie, rot: 4 Linien*)

relatives Verhältnis der Protonen zueinander über das Integral (Fläche unter der Kurve) des Signals (*Beispiel: grün: 3, blau: 3, rot: 2*)

¹H-Chemische Verschiebungen von organischen Verbindungen

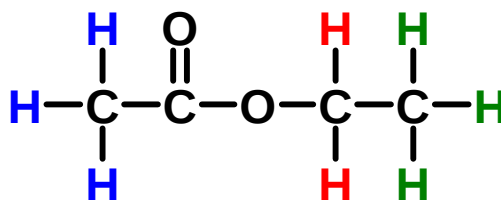


Kopplungen

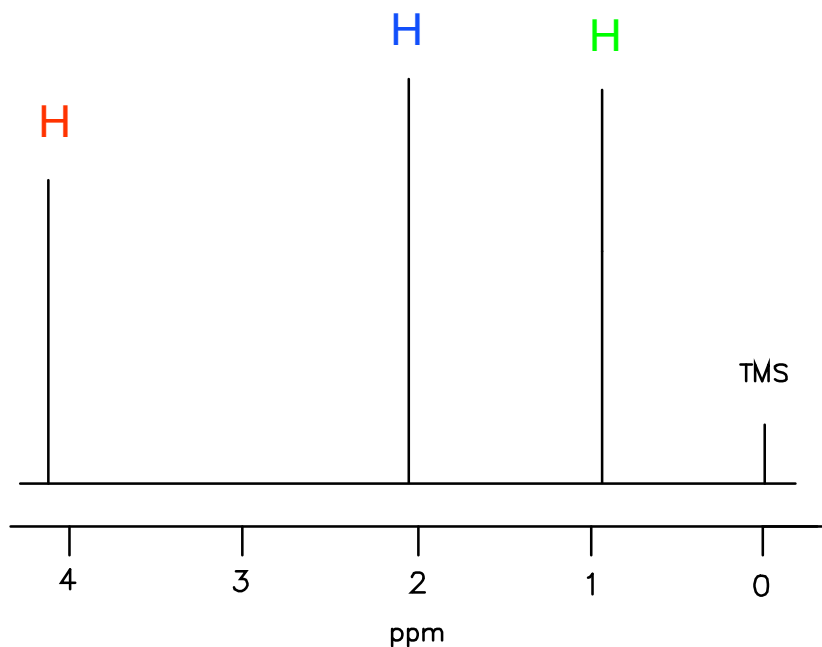
NMR-aktive Nachbarkerne, insbesondere Kerne mit einem Spin von $I=1/2$, bewirken über magnetische Kopplungen eine Feinaufspaltung der Resonanz, da das Eigenmagnetfeld der Nachbarkerne das Magnetfeld am Kernort und damit die Lage der Resonanz der gerade beobachteten Kernsorte beeinflusst

(Beispiel: rote Kerne beeinflussen grüne Kerne, grüne Kerne beeinflussen rote Kerne, blaue Kerne werden nicht beeinflusst, da sich in direkter Nachbarschaft keine Protonen befinden).

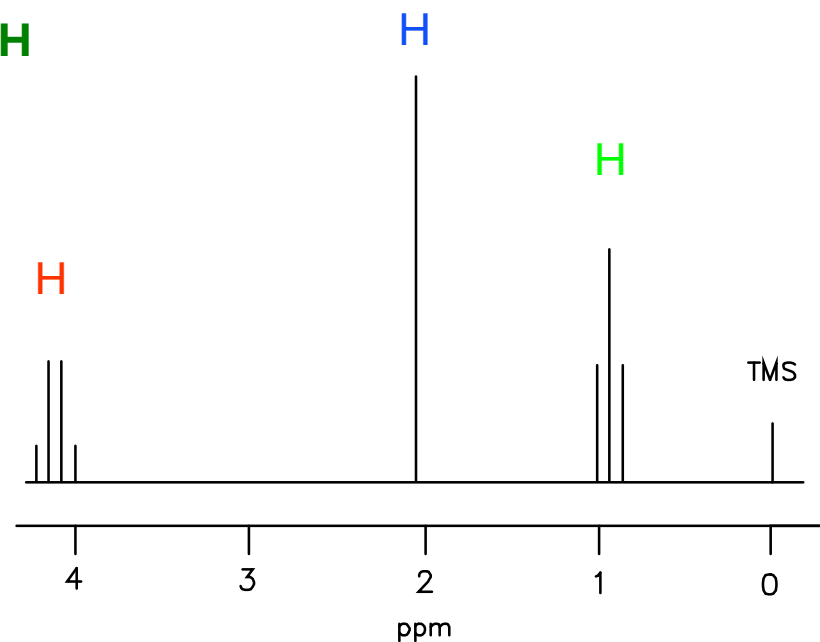
Essigsäureethylester



Spektrum ohne Kopplungen



beobachtetes Spektrum



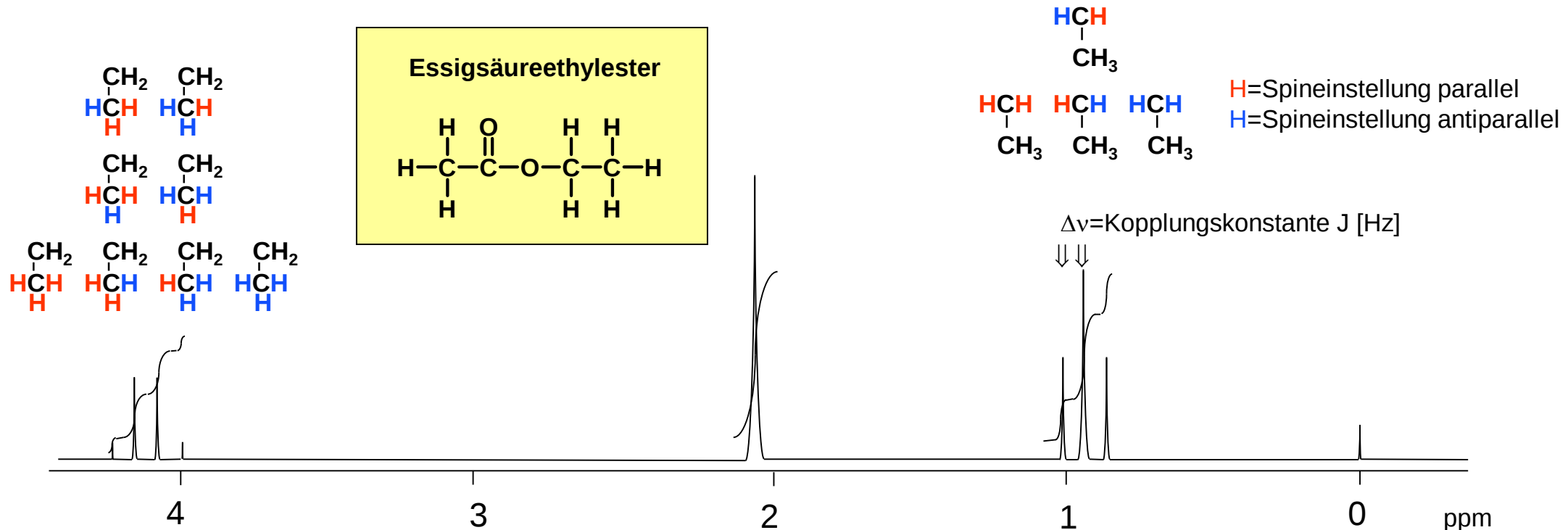
Kopplungen

Die Spins der Protonen in der Nachbarschaft einer beobachteten Protonensorte können sich entweder parallel oder antiparallel relativ zum äußeren Magnetfeld einstellen. Daraus resultierenden Einstellungsmöglichkeiten ergeben aus der Statistik.

Beispiel: CH₂-Gruppe (Signal bei 4.12 ppm); für die Einstellung der Protonen in der Nachbar-CH₃-Gruppe ergeben sich folgende Einstellungszustände

- | | |
|---|-----------------|
| - alle drei Protonen sind antiparallel ausgerichtet: | 1 Möglichkeit |
| - zwei Protonen sind antiparallel und ein Proton ist parallel ausgerichtet: | 3 Möglichkeiten |
| - ein Proton ist antiparallel und zwei Protonen sind parallel ausgerichtet: | 3 Möglichkeiten |
| - alle drei Protonen sind parallel ausgerichtet: | 1 Möglichkeit |

Die Größe der Feinaufspaltung (Abstand zwischen den einzelnen Linien in Hz) wird als Kopplungskonstante J bezeichnet.



Multiplizitätsregeln für die Signalstruktur

$$M = 2nI + 1$$

- M: Anzahl der Linien des Signals
 n: Anzahl der koppelnden Kerne
 mit gleicher Kopplungskonstante
 I: Spinquantenzahl

bei $I=1/2$ vereinfacht sich das zu $M=n+1$

Anzahl der Kopplungspartner	Muster und Intensität der Linien des Signals								Bezeichnung der Linienstruktur
n = 0					1				Singulett
n = 1				1		1			Dublett
n = 2			1		2		1		Triplet
n = 3			1		3		3		Quartett
n = 4			1		4		6		Quintett
n = 5		1		5		10		10	Sextett
n = 6	1		6		15		20		Septett