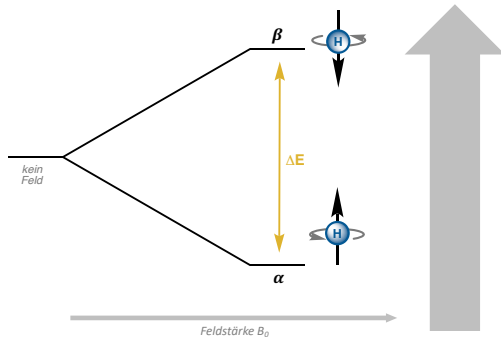


NMR-Spektroskopie

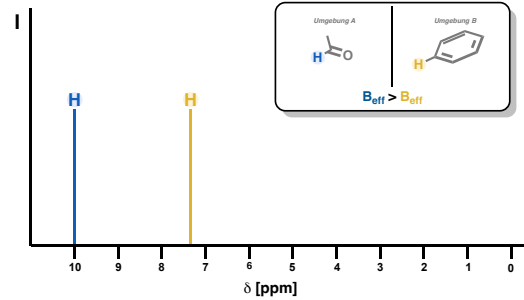
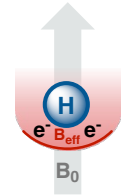
Grundprinzip

- In einem externen Magnetfeld B_0 orientieren sich Atomkerne mit Kernspin I entlang oder entgegen der magnetischen Feldlinien
- Zwischen α - und β -Spin liegt die Energiedifferenz ΔE (Zeemann-Effekt)



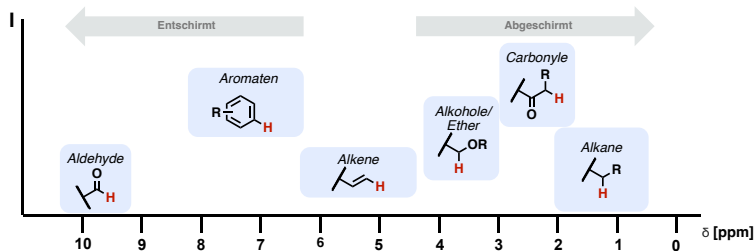
ΔE hängt ist abhängig von...

- Stärke des Magnetfelds (B_0)
- Kerntyp (^1H , ^{13}C , ...)
- Chemische Umgebung (B_{eff})**



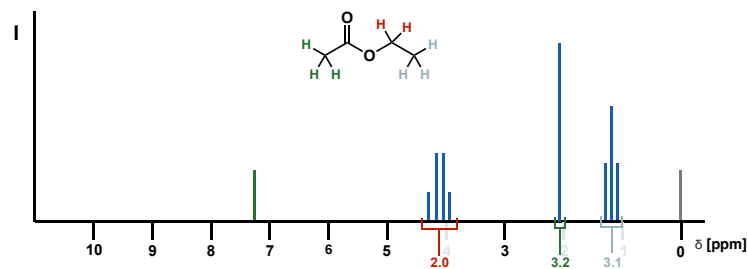
Auswertung

Chemische Verschiebung



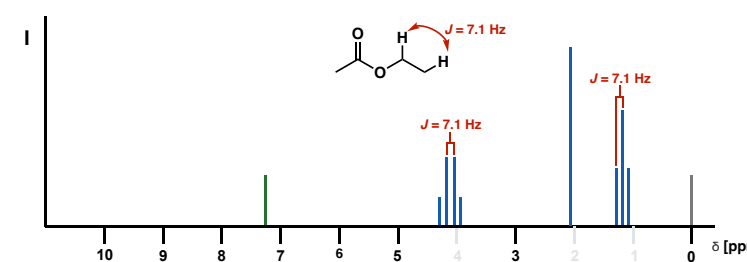
- Wird als relative Skala in ppm angegeben
- TMS als Standard bei 0 ppm
- Protonen mit wenig Elektronendichte links im Spektrum (downfield)
- Protonen mit viel Elektronendichte rechts im Spektrum (upfield)

Integrale



- Fläche unter der Signalkurve
- Stets relativ zu anderen Signalen
- Integralwerte können durch Verunreinigung oder unscharfes Spektrum abweichen

Spin-Spin-Kopplung



- Über Bindungen benachbarte Kerne koppeln und spalten auf
- Anzahl Linien = $n + 1$
- Dublett, Triplet, Quartett, ...
- Abstand der Linien wird als Kopplungskonstante J bezeichnet
- Wechselwirkende Kerne besitzen dieselbe Kopplungskonstante