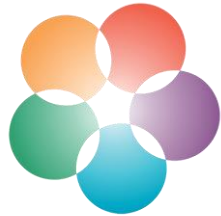
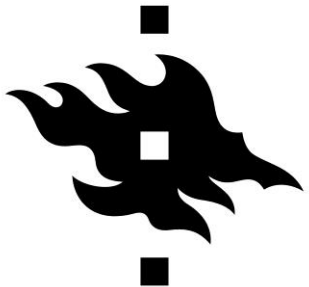




Kemianluokka
Gadolin



LUMA-KESKUS
SUOMI



HELSINGIN YLIOPISTO

Ydinmagneettinen resonanssispektroskopia eli NMR



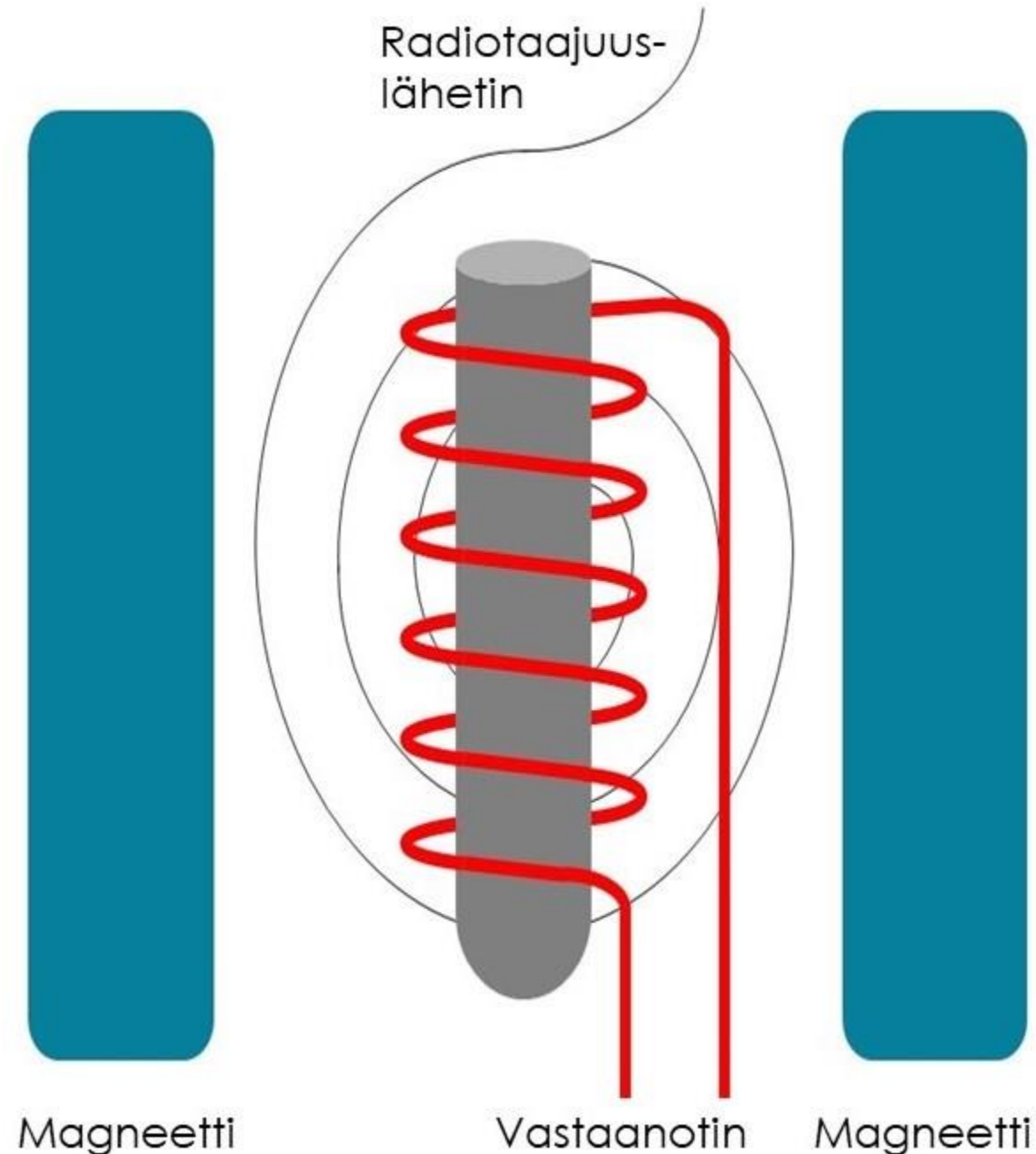
NMR eli ydinmagneettinen resonanssispektroskopia

- Antaa tietoa molekyylin liikkeistä sekä rakenteesta
- Toiminta perustuu aktiivisten atomiytimien ja magneettikentän vuorovaikutukseen
- Käytetyimmät tekniikat
 - ^1H -NMR
 - ^{13}C -NMR
- Magneettikuvauksessa sovelletaan NMR-spektroskopiaa

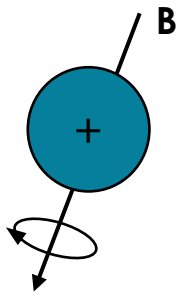


NMR-spektrometrin toiminta

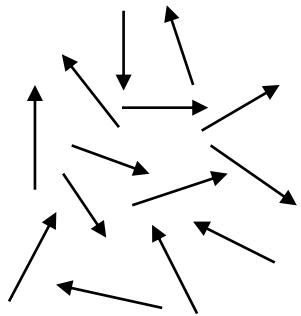
- Nestemäistä näytettä lisätään näyteputkeen
- Näyteputki asetetaan joko
 - näytekaruselliin tai
 - NMR-spektrometrin kammion yläosassa sijaitsevaan aukkoon ilmapatjan päälle
- Tietokoneella annetulla komennolla näyte laskeutuu kammion sisään
- Kammio on täytetty nestemäisellä heliumilla
- Laite koostuu
 - Suprajohdemagneetista
 - Radiotaajuuslähettimestä
 - Vastaanottimesta



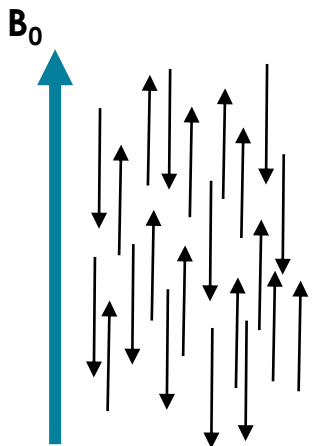
NMR-spektrometrin toimintaperiaate



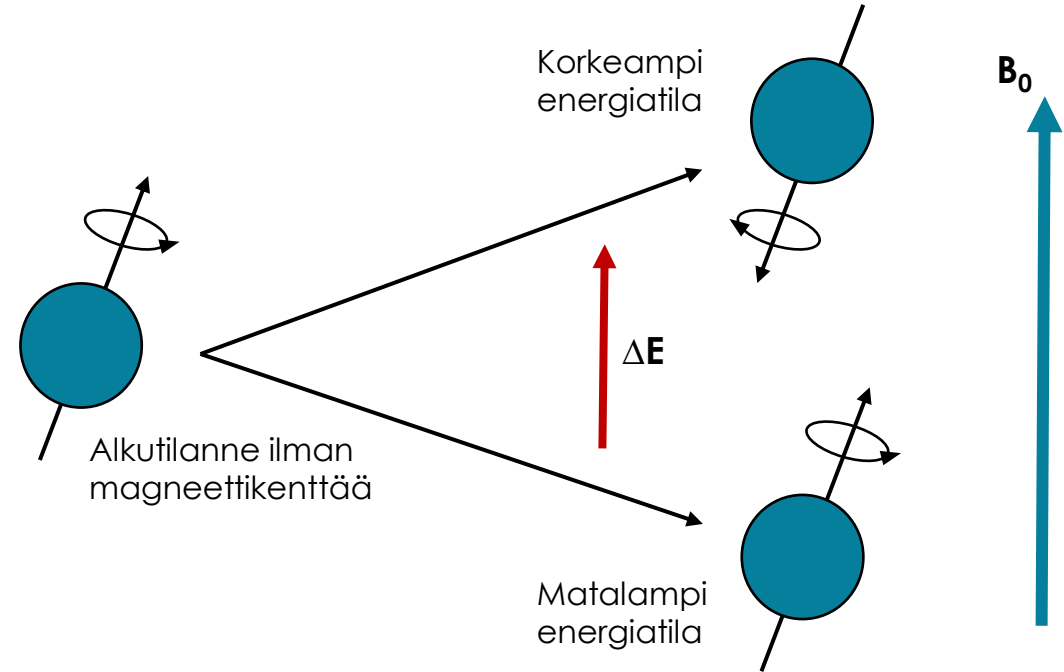
Ydiniukkasten pariton määrä aiheuttaa atomille **ydinspinin**. Ydinspinin ja ytimen varauksen vaikutuksesta syntyy magneettikenttä **B**.



Ilman ulkoista magneettikenttää ytimet ovat suuntautuneet satunnaisesti eri suuntiin.



Kun magneettiset ytimet joutuvat ulkoiseen magneettikenttään **B₀**, ne voivat siirtyä perusenergiatilaansa korkeammalle tai matalammalle energiatilalle. Ytimet suuntautuvat ulkoisen magneettikentän vaikutuksesta joko kentän suuntaisesti tai sille vastakkaiseen suuntaan.



Kun radiotaajuista säteilyä, jolla on sama energia kuin ΔE eli energiatilojen välinen ero, kohdistetaan näytteeseen, ytimen spin vaihtaa suuntaa. Näitä energiatilojen välisiä edestakaisia siirtymiä kutsutaan resonoinniksi. Ytimen palautuessa matalampaan energiatilaan emittoi se elektromagneettisia signaaleita, joiden taajuus riippuu magneettikentästä ja ytimen kemiallisesta ympäristöstä. Jokainen ydin resonoi omalla taajuudellaan.



NMR-spektrin tulkinta






- NMR-spektrin mittayksikkönä käytetään **kemiallista siirtymää δ** , jonka yksikkö on ppm
- Kemialliseen siirtymään vaikuttaa kemiallinen ympäristö
 - Naapuriatomin elektronegatiivisuus
 - Sidosten laatu ja kulma

Katso MAOL-
taulukot!

H-ytimen ympäristö	Selite	Kemallinen siirtymä (ppm)
R-CH ₃	primäärinen	0-4
R ₂ CH ₂ tai R ₃ CH	sekundäärinen tai tertiäärinen	1,5-4,5
ROH	alkoholi	0,5-8
RNH ₂	amiini	1-6
C≡C-H	alkyyini	2,5-3
XC-H	X = Br tai Cl tai I	2,5-4
FC-H	alkyylifluoridi	4-4,5
C=C-H	alkeeni	4-8
Ar-H	aromaattinen yhdiste	6-10
RCHO	aldehydi	8-10
RCOOH	karboksyylihappo	9-13



NMR-spektrin tulkinta

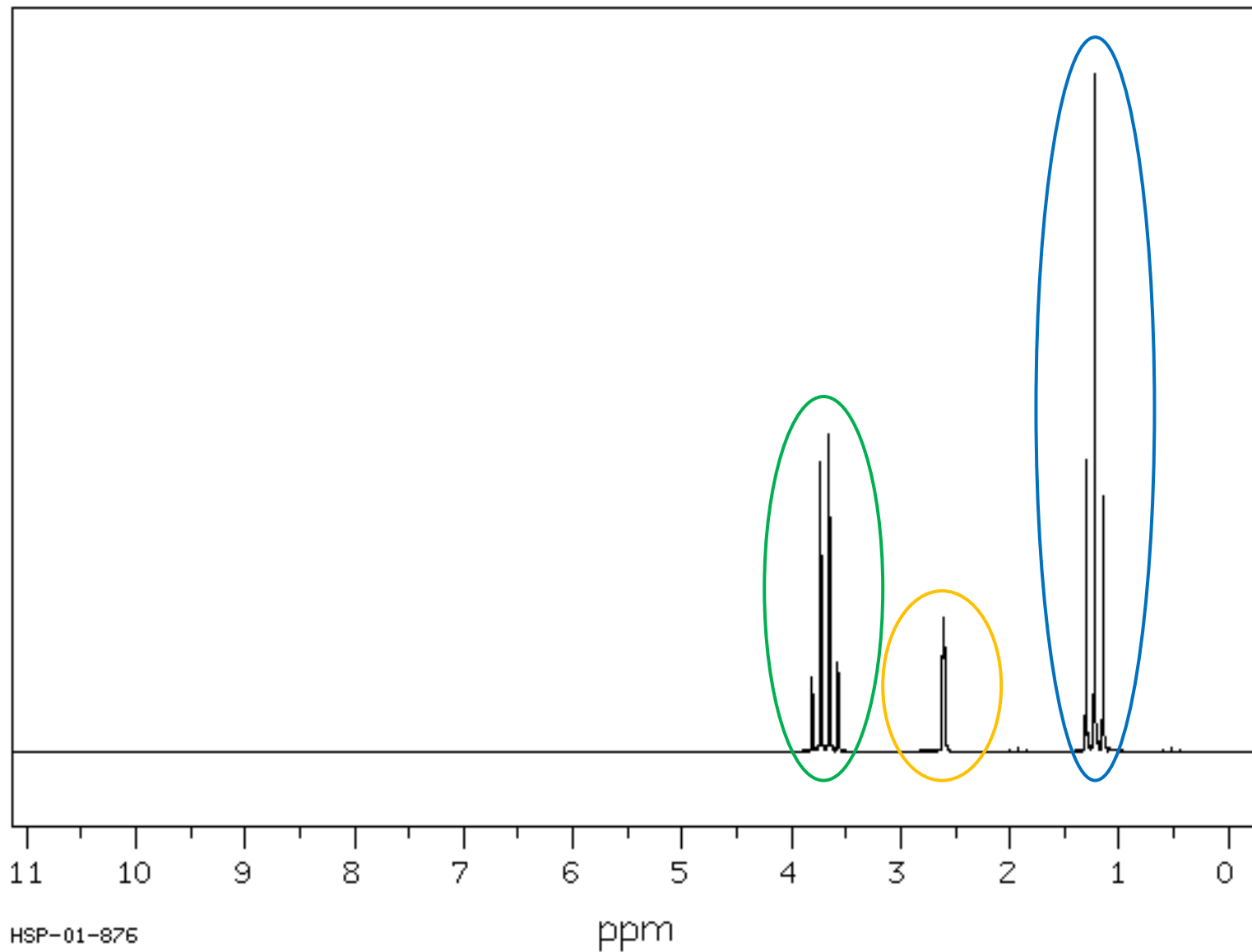
Naapuriydinten lkm	Nimeäminen	Intensiteettien suhde	Piikit
0	Singletti	0	
1	Dubletti	1:1	
2	Tripletti	1:2:1	
3	Kvartetti	1:3:3:1	
4	Kvintetti	1:4:6:4:1	

Spektriä tulkittaessa tarkastellaan:

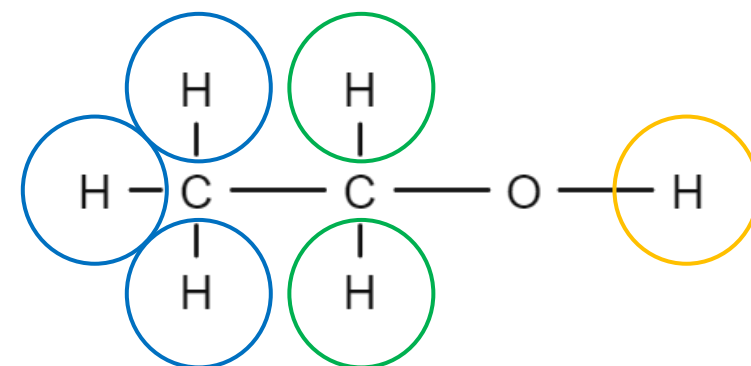
- Kemiallista siirtymää
- Signaalien lukumäärää
- Piikkien lukumäärää
 - $n + 1$ -sääntö
- Piikkien intensiteettejä



NMR-spektrin tulkinta

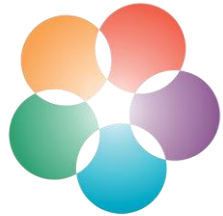


Katso MAOL-
taulukot!

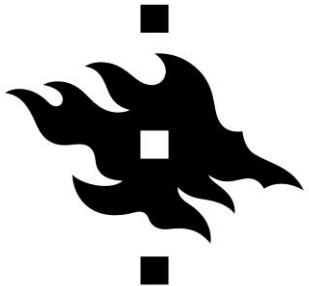




Kemianluokka
Gadolin



LUMA-KESKUS
SUOMI



HELSINGIN YLIOPISTO

Tekijät:
Saara Salminen
Veera Sinikallio
Vilja Kämppi