

Physikalisches Fortgeschrittenenpraktikum

Magnetische Kernresonanz (NMR)

– *Auswertung* –

Armin Burgmeier Robert Schittny

Vorbemerkung: Die Ausmessung und Zuordnung der Spektren wurde jeweils direkt auf den Millimeterpapierbögen mit den Spektren durchgeführt. Wir wollen uns hier auf die Beschreibung einiger Besonderheiten beschränken, falls diese nicht schon ausreichend in den ausgemessenen Spektren auftauchen.

1. Kopplung der OH-Gruppe

Auf allen Spektren in denen eine Substanz untersucht wurde die eine OH-Gruppe enthält ist auffällig, dass die OH-Gruppe entgegen unserer Erwartungen nicht mit benachbarten Gruppen koppelt. Der OH-Peak ist daher nicht aufgespalten, und die jeweiligen benachbarten Peaks nicht so sehr wie erwartet.

Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Wasserstoffkerne bei ihrem Absorptionsverhalten nicht ihre direkte Umgebung wahrnehmen, sondern eine zeitliche Mittelung derselben, während der Dauer des Absorptionsvorgangs. Wegen der Wasserstoffbrückenbildung an den OH-Gruppen tauschen mehrere Moleküle den OH-Wasserstoff laufend aus. Während der Absorption spielen also auch die H-Atome von OH-Gruppen anderer Moleküle eine Rolle. Deren Spin ist aber statistisch verteilt, sodass sich der hier erwartete Effekt herausmittelt.

Mit den Wasserstoffbrücken kann man auch erklären, dass die OH-Peaks deutlich breiter als die anderen Peaks sind. Die beteiligten OH-Wasserstoffkerne befinden sich nämlich in verschiedenen chemischen Umgebungen, die Abschirmung des Magnetfelds also variiert.

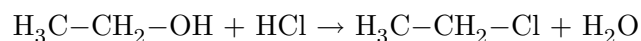
2. Undokumentierter Peak bei Ethanol + HCl (Spektrum Nr. 5)

Beim Vergleich der Spektren von Ethanol und Ethanol mit HCl verschwindet wie in der Vorbereitungsmappe dargestellt der OH-Peak da „durch das Beimengen der Säure die Lebensdauer der OH-Gruppe so kurz wird, daß sie keinen Einfluß mehr auf die umgebenden Kerne hat.“

A. Literatur

Wir möchten dies präzisieren, da in der Mappe der statt des OH-Peaks auftretende verschobene Peak nicht näher erläutert wird.

Das Beimengen von Chlorwasserstoff HCl zu Ethanol $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{OH}$ führt zu einer Säure-Base-Reaktion, bei der das Ethanol den Part einer Base übernimmt. Die Reaktionsprodukte sind *Ethylchlorid* und Wasser:



Hieraus wird klar, dass die OH-Gruppe verschwindet und durch H_2O ersetzt wird, was dann auch als Peak im Spektrum sichtbar wird. Die vorliegende Probe ist in Wirklichkeit also „Ethylchlorid plus Wasser“ anstatt „Ethanol plus Chlorwasserstoff“.

A. Literatur

- ^1H -NMR-Spektroskopie, Skript zur organisch-chemischen Grundausbildung im Rahmen des Bachelorstudiengangs Chemie an der Freien Universität Berlin [<http://userpage.chemie.fu-berlin.de/~tlehmann/gp/nmr.pdf>, abgerufen am 15. Januar 2009]