

## Chemical shifts of other Nuclides

- برای "ناجور هسته" (heteronucleides) معمولاً جایابی شیمیایی تنها پارامتر  
طیفی مورد استفاده در آنالیز است

- عمده‌ترین جایابی شیمیایی بسیار بزرگتر از محدوده‌های  $^1\text{H}$  و  $^{13}\text{C}$  است.

در بسیاری از عناصر افعال مشاهده دریاخیزه انیزوتروپ بوسله طیف سنجی NMR وجود دارد.

شش:  $^1\text{H}$ ,  $^2\text{H}$ ,  $^3\text{H}$

$^{10}\text{B}$ ,  $^{11}\text{B}$

$^{14}\text{N}$ ,  $^{15}\text{N}$

به جز شش مورد نام برده، اثر انیزوتروپی جایابی شیمیایی برای انیزوتروپها فقط بزرگتر از  $10^6$  است

نابراین محل تعیین کننده اتم‌های اندروتریپ ضایع برای آنالیز NMR ساده‌تر تشخیص و  
درجه‌های مکان ضایع‌ها است.

اگر عنصری اندروتریپ با اسپین هسته  $\frac{1}{2}$  داشته باشد معمولاً ترجیح داده می‌شود که عنصری از  
فردان طبیعی آن کم باشد ش  $^{15}\text{N}$

$^2\text{H}$  and  $^3\text{H}$

- در تریوم دار شدن یا تبادل H-D در آنند موجب نامید شدن سیگنال در طیف  
 $^1\text{H}$  NMR می‌شود  
که به تشخیص برخی از سیگنال‌ها کمک می‌کند

- جایگزین شدن برخی از پروتون‌ها با  $^2\text{H}$  طیف پروتون‌های باقی‌مانده را ساده‌تر می‌کند چون  
تأثیرهای جفت شدن H, D فقط عدد اسپین ششم ثابت‌های جفت شدن  $\text{H}, \text{H}$   
مربوط هستند و معمولاً فقط موجب کم شدن خلط از دانسی می‌شوند

- تعداد جابجایی شیمیایی  $^3\text{H}$  به تعداد پروتون  $^1\text{H}$  بسیار نزدیک است

- در بزرگ‌ترین حالت هسته  $^3\text{H}$  آن را به ایزوتوپ آل‌ترین هسته شناخته شد از نظر NMR تبدیل کرده است

با این حال عیب آن ناپایداری است ( $\beta$ -emitter) و باعث در کارهای خاص با ایزوتوپ کانی مورد استفاده در کار می‌گردد.

Boron  $^{10}\text{B}$  and  $^{11}\text{B}$

$I=3$   
٪۱۹,۹

$I=3/2$

این ایزوتوپ مانع از طیف  
بزرگتری دارد و فراوانی طبیعی

آن بیشتر است (٪۸۰,۱)

در عمل برای تجربه NMR

بترجیح اول استفاده

محدوده کله جابجایی شیمیایی: ۲۰۰ ppm

ماند مرجع:

$\delta=0$   $\text{BF}_3(\text{OEt}_2)$   
External standard

جابجایی شیمیایی به مقدار زیاد است تا اثر آکسیدان را که بطور مستقیم به اتم برده متصل هسته قرار نگیرد.

$$\delta[B(CH_3)_3] = +86.3$$

$$\delta[B(CH_3)(OCH_3)] = +53.8 \quad \text{تعداد ایزوپروپیل‌ها در}$$

$$\delta[B(CH_3)(OCH_3)_2] = +32.1 \quad \text{OR متصل به}$$

$$\delta[B(OCH_3)_3] = +18.3 \quad \text{اتم برده را به آسانی}$$

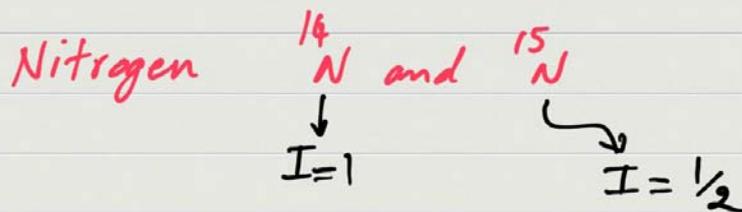
از درون جابجایی شیمیایی هر آن منفی دارد

از سرفت سیگنال هر آن عدد کرد دنیا سون اتم برده را تعیین نمود

$$\delta = +20 \text{ to } -128 \quad \text{four fold}$$

coordinated boron

$$\delta = +92 \text{ to } -8 \quad \text{threefold coordinated boron}$$



تأثیر لا برای حرارت در درج کمپات  
پس مده های فرکانس مده

مان جاقطنی الکترونی  $^{14}\text{N}$  نسبتاً کمپات و بنابراین سیگنال خفیف تر می باشد

محدود جابجایی شیمیایی 900 - 1000 ppm

سلسله ترین نیتروژن در آمین ها  
کمترین پرشیفتگی در ترکیبات نیتروژن

ماده استاندارد : نیتروژن (مایع)

استاندارد دیگر : محلول  $\text{NH}_4\text{NO}_3$   $\delta \text{ } ^{15}\text{NH}_4^+ \text{ ion} = 0$

Oxygen <sup>17</sup>O

شماره ایزوتوپ اکسیژن دارای سیگنال در NMR

$$I = 5/2$$

$$\% \text{ فراوانی طبیعی} = 0.038$$

دارای مان چار قطب الکتریکی (خبر بزرگ نیست)

سیدترین حسه <sup>17</sup>O ترکیبات با پیوند یگانه با اکسیژن مثل الکل‌ها و اترها

$$\delta = -50 \text{ to } +100$$

$$\delta[\text{H}_2\text{O}] = 0$$

کم پرشده ترین در نیتروسل‌ها 800 ppm  
و ترکیبات نیتروژن 600 ppm

که در آنها اتم اکسیژن پیوند دوگانه دارد

گروه کربوکسی  
 $O=C=O$  تنها یک سیگنال در دهه

↓  
 در دهه  $\delta$  این *isochronous* هسته

Fluorine  $^{19}F$

$I = 1/2$   
 فراوانی طبیعی = ۱۰۰٪

حالت  $^1H$   
 مشاهده این هسته کمی از آب فرسین سرد است

مردم کیکال سینت وسیع تر از  $^1H$  است

# phosphorus $^{31}\text{P}$

زردمانش های  $^{31}\text{P}$  مانند  $^1\text{H}$  و  $^{19}\text{F}$  بدون شکل قابل مشاهده است

مردود کیمیاگرافیک : مردود  $300\text{ ppm}$

نیابراین حتی تغییرات با فشاری کوچک

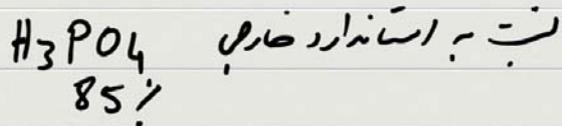
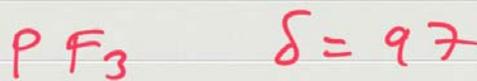
به شدت زیاد در طیف را تحت تأثیر قرار میدهد

مثلاً  $\text{P}(\text{CH}_3)_3$  و  $\text{P}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$  مردود  $40\text{ ppm}$  افتفا نشانده

در حال تقار  
در اینجا دقت داریم:

ionic character

و  
double bond  
character  
P-F پیوند



## Alkali and alkaline earth metals

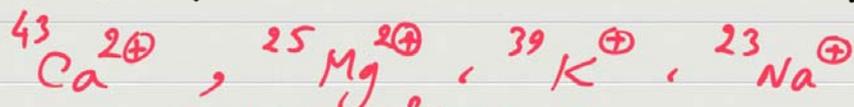
همگی دارای مان چاقو قطره و لا کرک هسته  
و بنابراین برای مطالعات NMR خیلی مناسب است

انفصالات برای مگناسیا مای این عناصر انجام شود

نتیج نشان دهنده جابجایی های شیمیایی به مقدار زیاد است تأثیر  
تأثیرات معکوس یون - یون قرار گیرد و بنابراین به ماهیت Counterions  
(مثل  $\text{I}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ )

مغناطیس در دام اهمیت دارند

برای: مول تک با مغناطیس گف به میزان برص خارجی



در مطالعات بر شیمیایی اهمیت دارند

شاهد  $^{23}\text{Na}^+$  آسان است  
در مورد  $^{25}\text{Mg}^{2+}$  و  $^{43}\text{Ca}^{2+}$  enriched کردن کردن ضروری است

عدد 600 ppm	Silicon	$^{29}\text{Si}$	$I = 1/2$	فاز اول 4.68٪
3000 ppm	Tin	$^{119}\text{Sn}$	"	8.59٪

علاوه بر کربن در عنصر مهم گروه IV که در مطالعات NMR مورد استفاده قرار گرفته اند سیلیکون و قلع هست.

موانع اثر در جابجایی شیمیایی: استکنا، فرج میرید، زوایای میرید و تعداد لیگاندهای کوآرڈینه شده.

ترکیب متبوع:  $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$  و  $(\text{CH}_3)_4\text{Sn}$

### The transition metals:

عدد ۲۰۰۰ ppm  
iron  $^{57}\text{Fe}$

جابجایی شیمیایی بر حسب استکنا و formal charge کمترین اثری تحت تاثیر قرار میگیرد.

دارد کربان یکتا گروه پیش به مرفقت زینا کمپلکس  $[\text{Fe}(\text{CO})_3(1,3\text{-butadiene})]$  تهیه شده است آهن را در مقایسه با کمپلکس بدون استکنا به میزان ۱.۵ ppm کاهش میدهد در حالی که تاثیر گروه پیش trans عدد ۱۲۰ ppm است.

platinum  
 $^{195}\text{Pt}$

$$I = 1/2$$

33.83% : فراوانی طبیعی

مردود جابجایی شیمیایی : هزاران ppm

