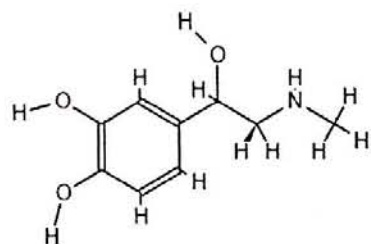
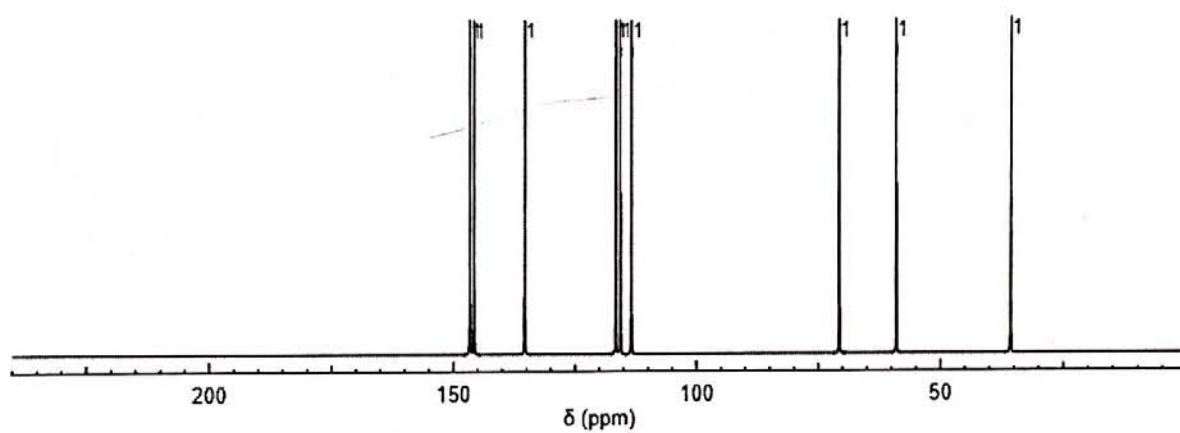


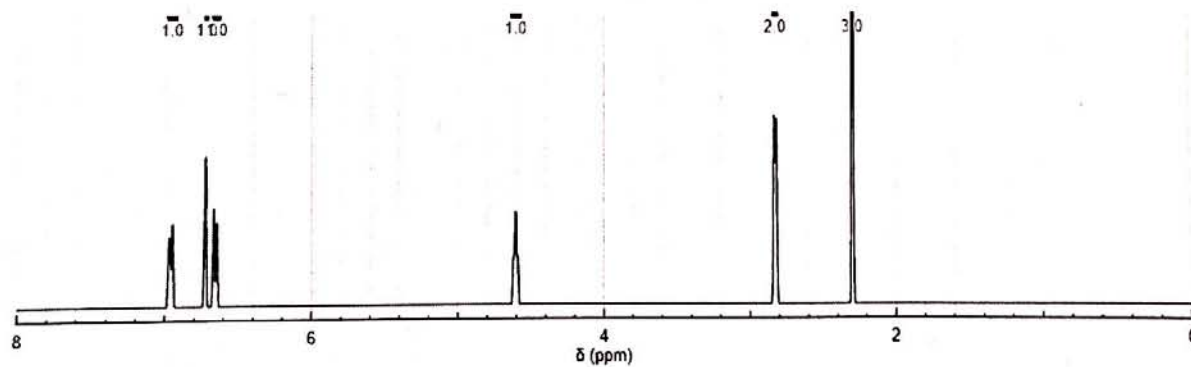
## H-NMR Spektroskopie: Einführung



C-NMR:



H-NMR:



## H-NMR Spektroskopie: Theorie

Genauso wie  $^{13}\text{C}$  haben auch Wasserstoffatome ( $^1\text{H}$ ) einen Kernspin und können somit in einem Kernspinresonanzspektrometer (NMR-Spektrometer) detektiert werden.

Wasserstoff Atome können zwei Spinzustände annehmen:

$$^1\text{H} \uparrow \text{ Spin "nach oben" } + \frac{1}{2} \quad \text{-oder-} \quad ^1\text{H} \downarrow \text{ Spin "nach unten" } - \frac{1}{2}$$

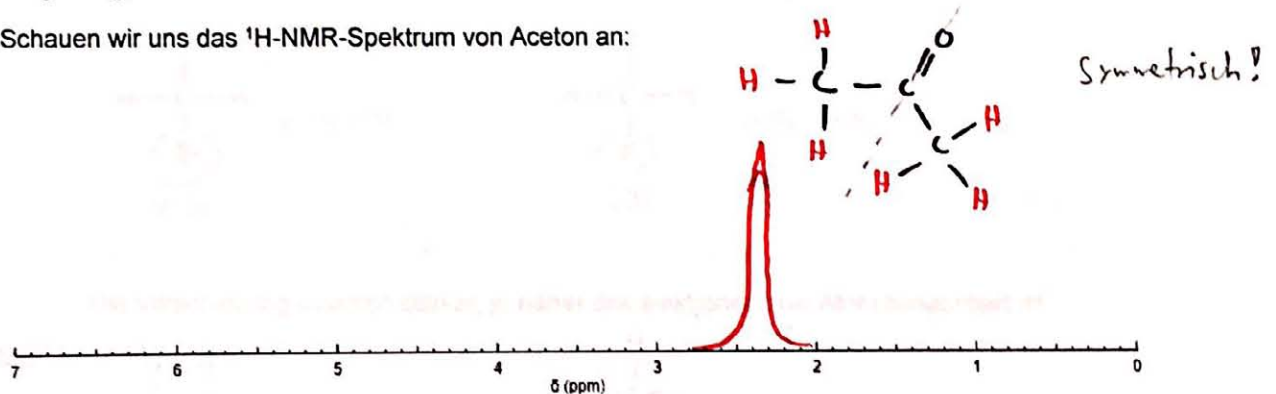
$^1\text{H}$ -NMR-Spektren sind sehr spezifisch für verschiedene Moleküle. Sie können darum dazu beitragen, von einem unbekanntem Molekül die Struktur herauszufinden.

Schauen wir uns an, welche **Eigenschaften** von Molekülen die  $^1\text{H}$ -NMR-Spektren beeinflussen.

### Die chemische Umgebung

Wie ein Spektrogramm eines bestimmten Moleküls aussieht, hängt stark von der chemischen Umgebung, also von der Nachbarschaft der einzelnen H-Atome in einem Molekül ab.

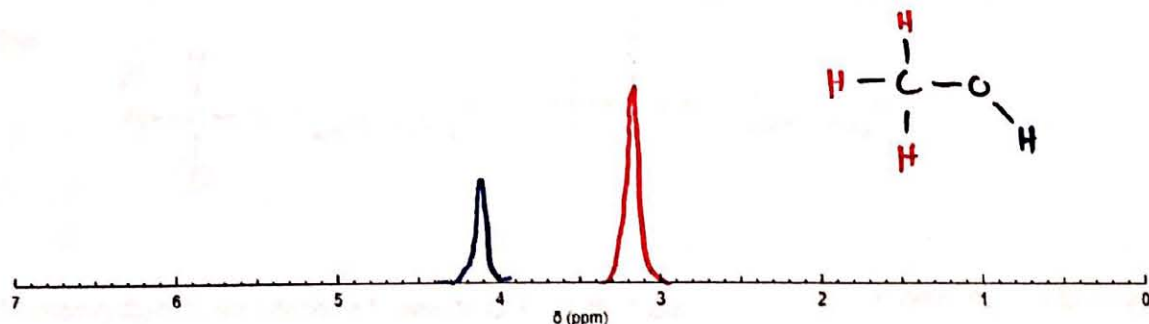
Schauen wir uns das  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrum von Aceton an:



Erkenntnis:

H-Atome mit gleicher chemischer Umgebung liefern dasselbe Signal

Anders sieht das Spektrum bei Methanol aus.



Erkenntnis:

H-Atome mit unterschiedlicher chemischer Umgebung liefern unterschiedliche Signale

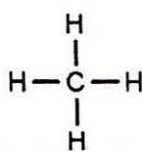
### Chemische Verschiebung

Wo auf der x-Achse des  $^1\text{H}$ -NMR-Spektrums ein Signal erscheint, hängt ebenfalls von der chemischen Umgebung eines H-Atoms ab. Die x-Achse in ppm (oft mit „ $\delta$ “ abgekürzt) ist ein Maß dafür, wie stark die chemische Verschiebung ist.

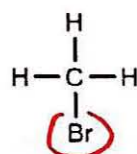
Es gelten folgende Daumenregeln:

- Ein H-Atom erfährt eine stärkere chemische Verschiebung (d.h. das Signal erscheint weiter links), wenn es einem **elektronegativen Atom** benachbart ist.

Bsp:



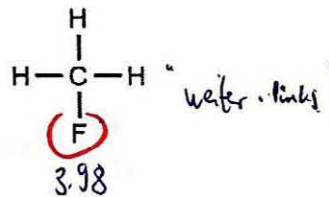
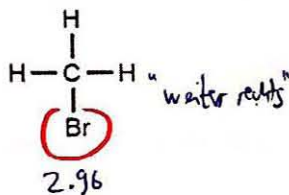
Schwächere  
chemische  
Verschiebung  
"weiter rechts"



Stärkere  
chemische  
Verschiebung  
"weiter links"

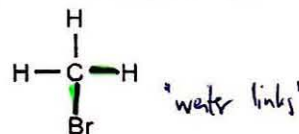
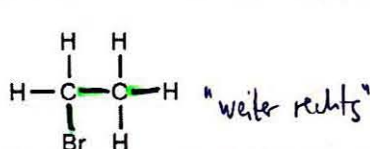
- Die Verschiebung ist umso stärker, je **elektronegativer** das benachbarte Atom ist

Bsp:



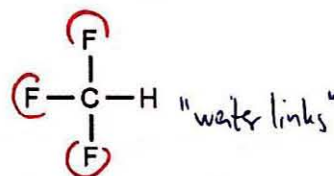
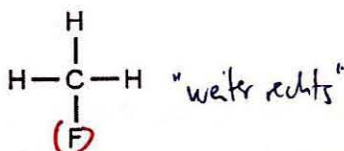
- Die Verschiebung ist umso stärker, je **näher** das elektronegative Atom benachbart ist.

Bsp:



- Die Verschiebung ist umso stärker, je **mehr** elektronegative Atome benachbart sind.

Bsp:



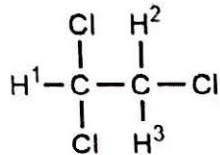
Elektronegative Atome können z.B. sein N, O, F, Cl, Br, I, etc..

Tabellen verteilen!

### Aufspaltung

H-Atome werden nicht nur durch elektronegative Nachbar-Atome beeinflusst, sondern auch durch andere H-Atome. Benachbarte H-Atome, welche sich in einer chemisch verschiedenen Umgebung befinden, ändern das Magnetfeld für ein gegebenes H-Atom. Diese Änderung kann verstärkend oder abschwächend sein und ist abhängig von dem Spin der benachbarten H-Atome. Deshalb spaltet sich das Signal für das betrachtete H-Atom auf.

Betrachten wir uns zum Beispiel folgendes Molekül:

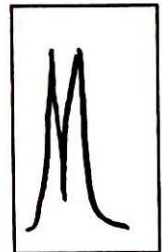


Betrachten wir zunächst das Signal, welches uns H<sup>2</sup> und H<sup>3</sup> liefern wird:

- H<sup>2</sup> und H<sup>3</sup> haben die gleiche chemische Umgebung (weil sie an dasselbe C-Atom gebunden sind) und üben deshalb keinen Einfluss aufeinander aus.
- Sie spüren jedoch das chemisch verschiedene H<sup>1</sup>

-H<sup>1</sup> kann zwei Spinzustände haben:  $\uparrow$  oder  $\downarrow$

-Ein Spinzustand verstärkt das magnetische Feld für H<sup>2</sup> und H<sup>3</sup> der andere schwächt es ab. Das Signal wird also aufgespalten und sieht dann so aus:



Welches Signal wird uns wohl H<sup>1</sup> liefern?

- H<sup>1</sup> spürt eine Beeinflussung seines Magnetfeldes von H<sup>2</sup> und H<sup>3</sup> gleichzeitig

- H<sup>2</sup> und H<sup>3</sup> können folgende Spinzustände haben:  $\uparrow\uparrow$  oder  $\uparrow\downarrow$  oder  $\downarrow\uparrow$  oder  $\downarrow\downarrow$

- Insgesamt wird das Magnetfeld von H<sup>1</sup> also von 3 möglichen Spinzuständen beeinflusst (Nicht vier, da der zweite Spinzustand identisch zum dritten ist).

Das Signal sieht dann so aus:

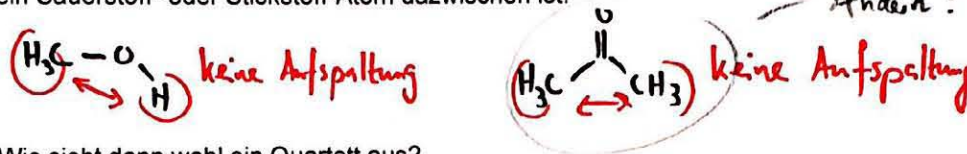




Allgemein gilt:

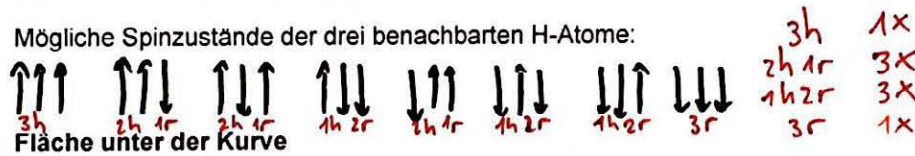
Aufspaltung	Anzahl gebundener H-Atome am benachbarten C-Atom
Keine Aufspaltung (Singlett)	Kein H-Atom
Zwei Linien (Dublett)	Ein H-Atom
Drei Linien (Triplet)	Zwei H-Atome
Vier Linien (Quartett)	Drei H-Atome

Hinweis: Die Aufspaltung funktioniert nicht, wenn zwischen den H-Atome mehr als zwei C-Atome oder ein Sauerstoff- oder Stickstoff-Atom dazwischen ist!



Wie sieht dann wohl ein Quartett aus?

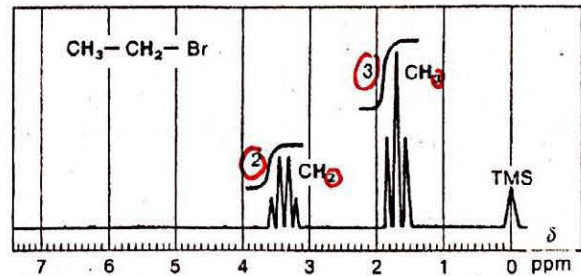
Mögliche Spinzustände der drei benachbarten H-Atome:



Manchmal ist in einem H-NMR-Spektrum angegeben, wie gross die Fläche unter einem Signal ist, wie in folgendem Spektrum von Bromethan zu sehen:

Die Zahl über dem Signal gibt an, wie gross die Fläche unter der Kurve ist.

Die Fläche unter der Kurve entspricht der Anzahl H-Atome, welche das Signal verursachen.



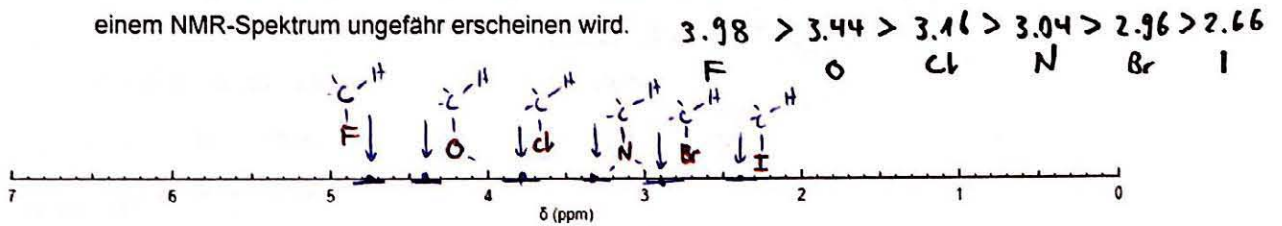
## H-NMR Spektroskopie: Arbeitsblatt

Das Wichtigste der Theorie:

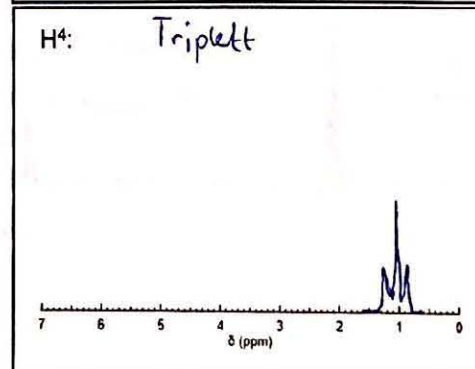
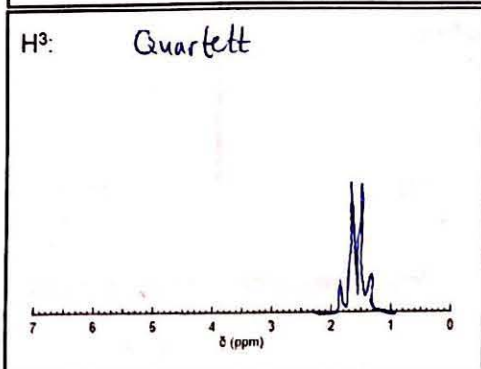
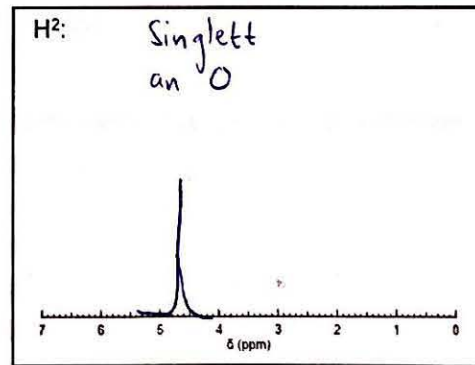
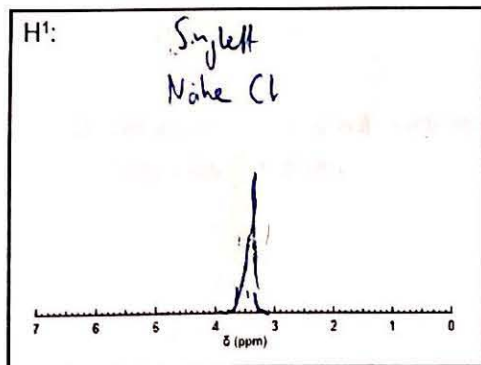
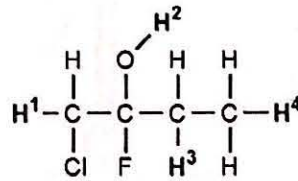
- Anzahl der Signale => Anzahl H-Atome mit unterschiedlicher chemischer Umgebung
- Aufspaltung der Signale => Anzahl benachbarter H-Atome
- Chemische Verschiebung => Elektronegative Atome als Bindungspartner oder in unmittelbarer Nähe

1) In gleicher Nähe zu einem Wasserstoff Atom befinden sich jeweils folgende Atome:

Sauerstoff, Iod, Brom, Stickstoff, Fluor, Chlor. Zeichnen Sie ein, wo das Signal des H-Atoms in einem NMR-Spektrum ungefähr erscheinen wird.

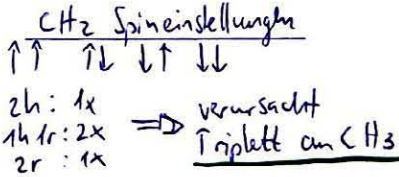
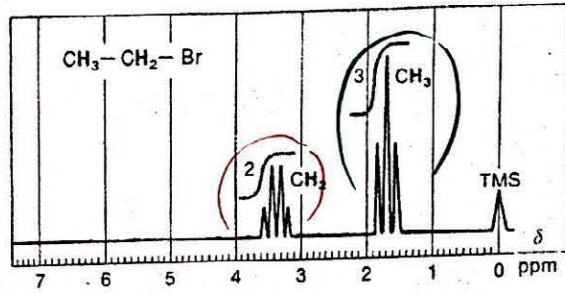
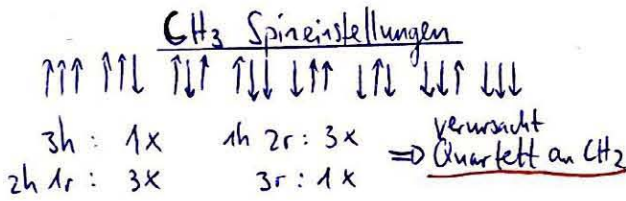


2) Mit welcher chemischen Verschiebung und Form erwarten Sie die Signale der folgenden gekennzeichneten H-Atome (H<sup>1</sup> bis H<sup>4</sup>)? Zeichnen Sie ein!



3) Erklären Sie in eigenen Worten die Aufspaltung der Signale im Spektrum von Bromethan.

Zeichnen Sie dazu die verschiedenen Spineinstellungen-möglichkeiten auf.

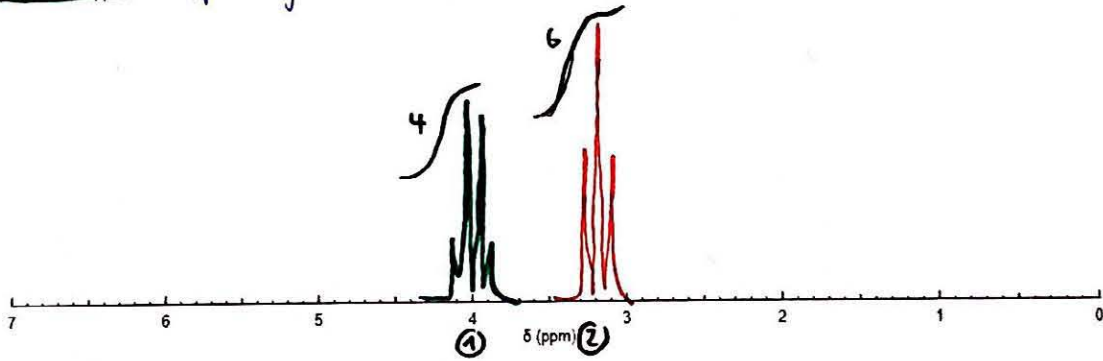
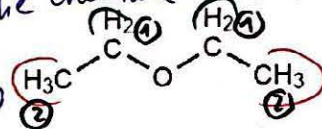


Chemische Verschiebung: CH<sub>2</sub> ist näher am Brom, deshalb ist die chemische Verschiebung größer ("weiter rechts")

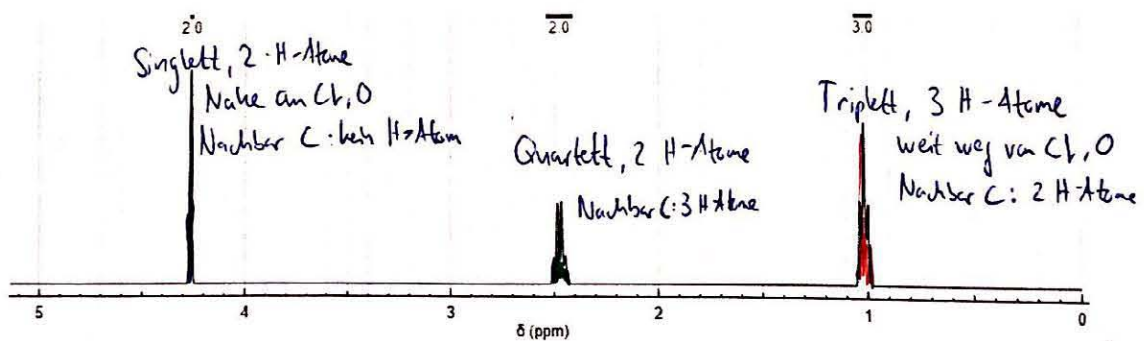
4) Zeichnen Sie ein H-NMR-Spektrum von Diethylether

CH<sub>3</sub>-Gruppen: Aufspaltung in Triplet, weiter weg von O

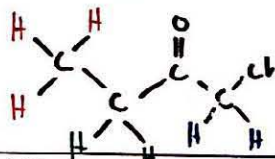
CH<sub>2</sub>-Gruppen: Aufspaltung in Quartett, näher an O



5) Sie wissen von einem Molekül lediglich die Summenformel C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>ClO und bekommen folgendes Spektrum:

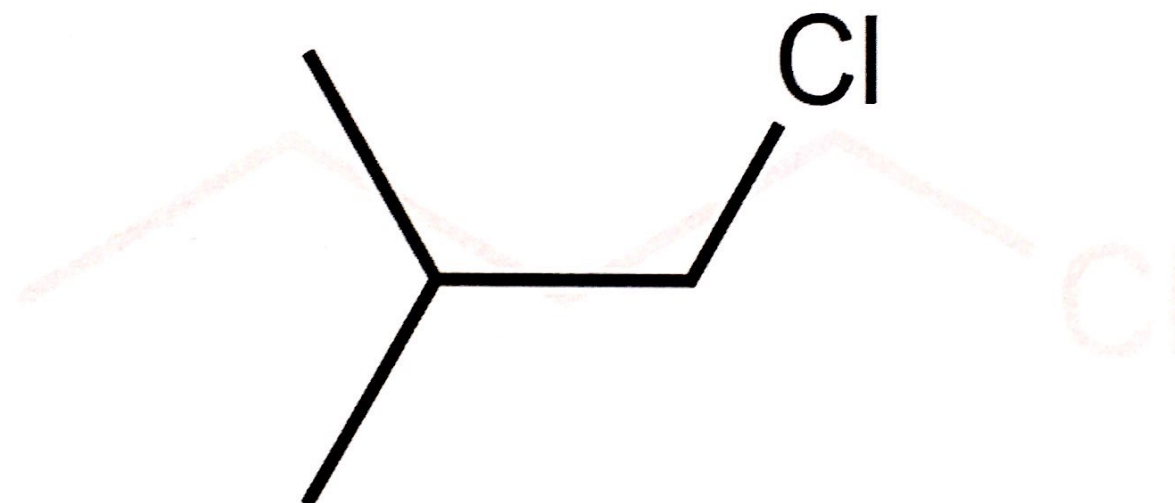


Um welches Molekül handelt es sich?



Summenformel:  $C_4H_9Cl$

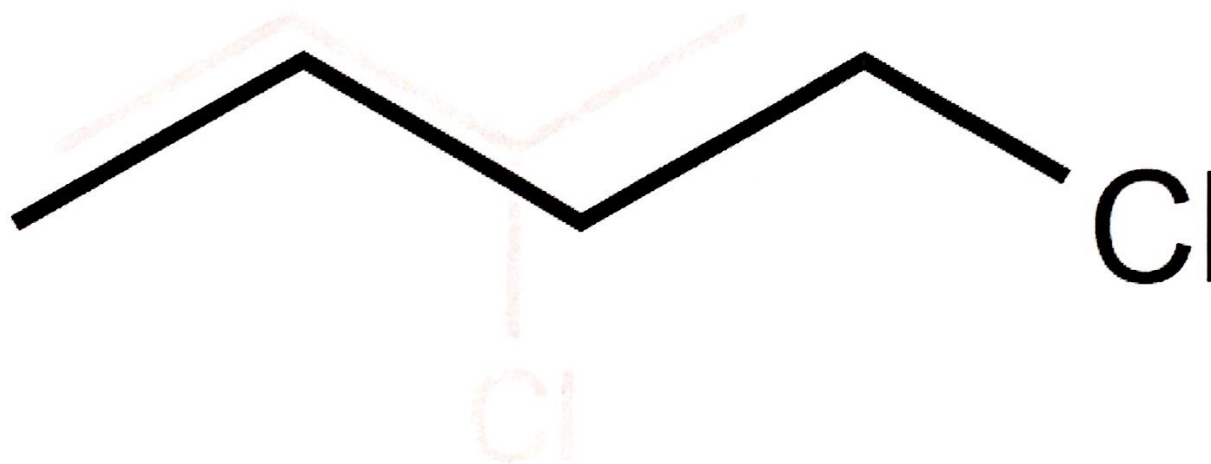
Dein Molekül:





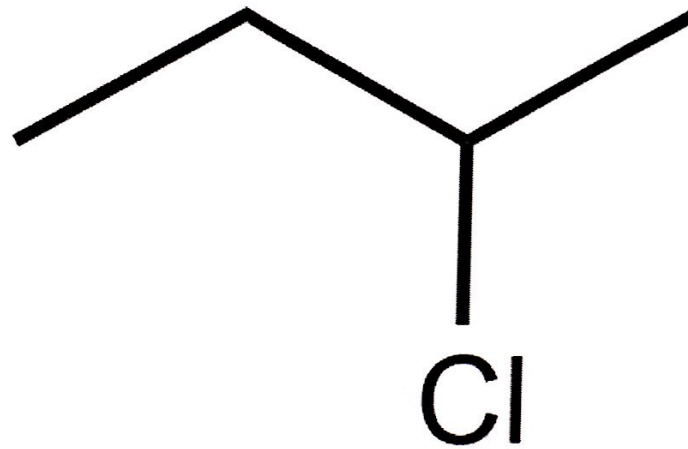
Summenformel:  $C_4H_9Cl$

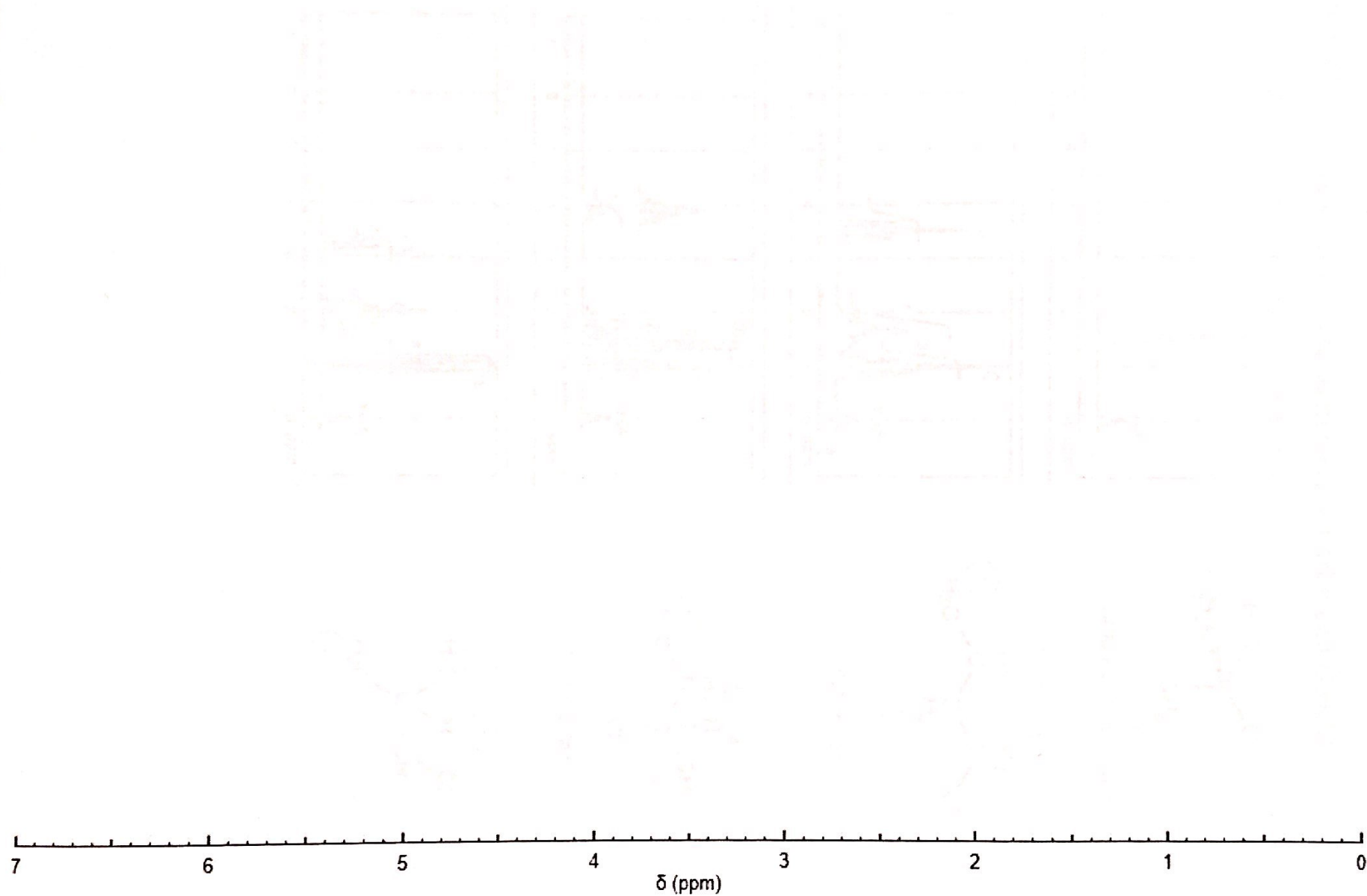
Dein Molekül:



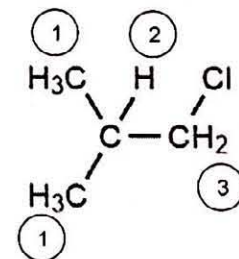
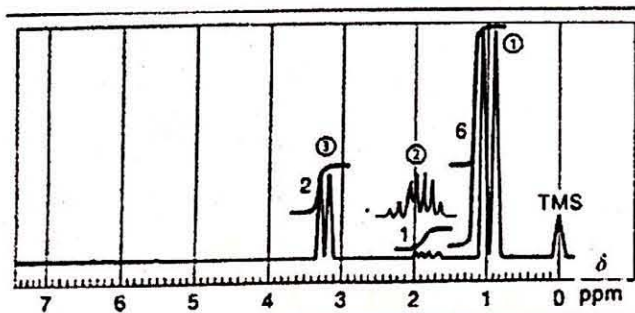
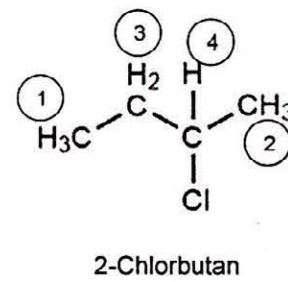
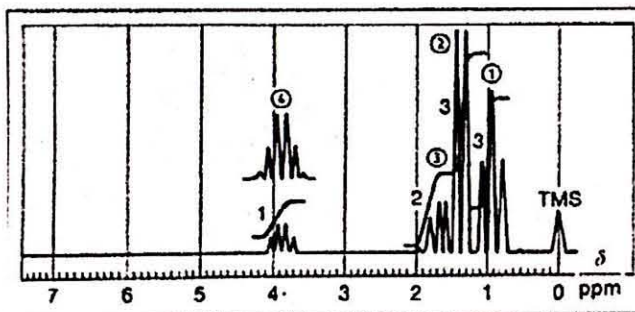
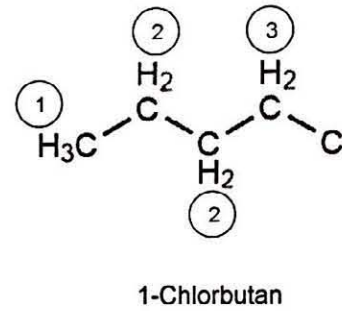
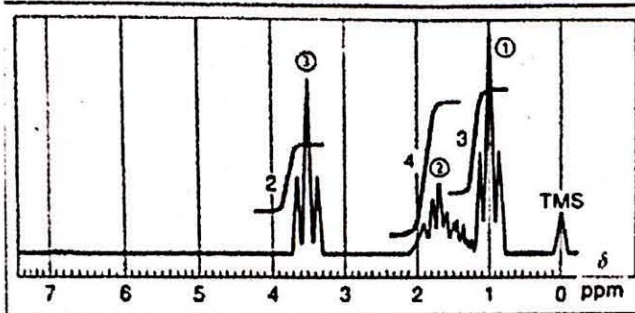
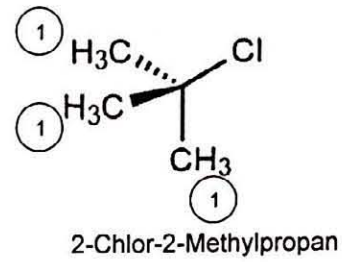
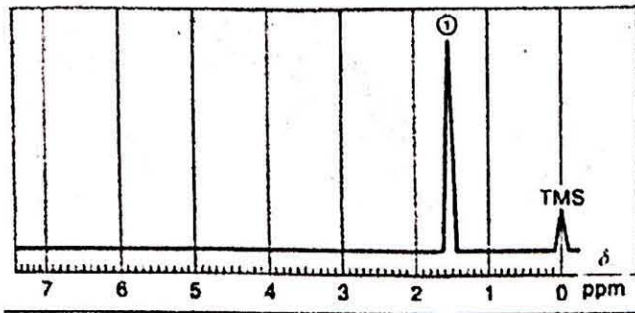
Summenformel:  $C_4H_9Cl$

Dein Molekül:





### H-NMR Spektroskopie: Lösungen Gruppenarbeit zu C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>Cl





# Synopsis

Thema: H-NMR

Klasse: SWP 12. Schuljahr

Datum: 27.03.2018

12 SuS

Operationalisierte Lernziele

1. Die SuS verstehen, dass Moleküle mit Wasserstoffatomen in einem Wasserstoff NMR-Spektrogramm spezifische Muster aufweisen
2. Die SuS kennen die Begriffe der chemischen Verschiebung sowie Dublett, Triplet und Quartett.
3. Die SuS können aus einfachen H-NMR Spektren auf die Struktur des Moleküls schliessen sowie von einem einfachen Molekül ein H-NMR Spektrum zeichnen

Did. Funktion	Sozialform	Unterrichts-Inhalt	Hilfsmittel	Bemerkungen	Zeit
Einstieg	Frontal	H-NMR Spektrum eines Naturstoffs <i>unterschied zu C</i>	Beamer		3'
Input	Frontal	Theorie Einstieg	Skript, Visualizer		17'
Verarbeitung	EA	Arbeitsblatt inkl. Besprechung	Arbeitsblatt		20'
Ergebnis-sicherung	Frontal	Besprechung Arbeitsblatt			10'
Vertiefung	GA	Expertenrunde: H-NMR Spektren erstellen			20'
Ergebnis-Sicherung	Frontal	Besprechen der Spektren			8'
Abschluss	Frontal	<i>entl. Quartett / Goppelt</i>			2'

Backup: