atomic number
عدد البروتونات. number of protons

atomic mass
(مجموع) عدد البروتونات والنيوترونات protons + N

element → الفرق بينهم بعدد ال N
النظائر - isotopes

NMR
→ neculous
P + N
+ ±

spining.
النواة تلف حول محور معين

العناصر اللي نهتم فيها ب NMR
عنصرين

السبب انهم بحتاجوا طاقة قليلة ← C element , H element
(باقي العناصر فيها spin بس بحتاجوا طاقة كبيرة)

98.9% main — P=6 / N=6 ← C^{12}

1.1% — P=6 / N=7 ← C^{13}

H^1 atomic mass = 1
P=1 / N=0
متوفر بالطبيعة
99.9%

النظائر ل H
هو H^2
P=1 / N=1
نسبته 0.1%

odd → عدد فردي
even → عدد زوجي

قاعدة: عدد ال atomic number
OR mass number
كان odd يمكن تحليله بال NMR

* even توزيع normal
النواة مابتولد magntic feild لانه متوزع بشكل متجانس.
spherical

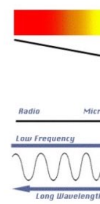
* odd ← التوزيع مش بشكل متجانس
فالنواة رح تلف وتولد magntic feild ← عبارة عن North south
→ spin

الموجات المستخدمة بهاي instrument
هي radio waves. ← تؤثر على النواة
→ low energy
high wavelength.
as we remember

NMR S

NMR spectroscopy is a form o

→ radio waves

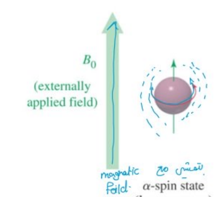


Most absorption techniques (e
the electrons… in the case of
determines the response.

An applied (*magnetic*) field is

Nuclear Magnetic
direct observation

Nuclei are positively charged and spin on a



Not all nuclei are suitable for NMR.
من نظائر ال C
^{1}H and ^{13}C are the most important NMR
Natural Abundance
^{1}H 99.9% ^{13}C 1.1%
^{12}C 98.9% (not NMR a

Spectral Properties, Applicati
Radiation

Energy		Wave Number V	Wavelength λ	Fr
Kcal/mol	Electron volts, eV	cm⁻¹	cm	
x 10^7 9.4	x 10^6 4.9	x 10^10 3.3	x 10^-11 3	
x 10^3 9.4	x 10^2 4.9	x 10^6 3.3	x 10^-7 3	

spinning proton loop of current bar m

Spin Quantum Numbers

كم حركة ؟ مش مطلوب

Energy levels for a nucl

No field

Energy

0

The number of spin states is $\boxed{2I + 1}$, where **I** is the spin quantum number.

not active ما بتعمل شي I = 0 اذا ال

- If the number of neutrons **and** the number of proton then the nucleus has **NO** spin.
- If the number of neutrons **plus** the number of proton the nucleus has a half-integer spin (i.e. 1/2, 3/2, 5/2)
- If the number of neutrons **and** the number of proton then the nucleus has an integer spin (i.e. 1, 2, 3)

عدد صحيح

SPIN QUANTUM NUMBERS OF SOME COMMON NU

The most abundant isotopes of C and O do not

Element	^1H	^2H	^{12}C	^{13}C	^{14}N	^{16}O	^{19}F
Nuclear Spin Quantum No (I)	1/2	1	0	1/2	1	0	
No. of Spin States	2	3	0	2	3	0	2

Elements with either odd number of protons or neutro mass number or odd atomic number) have the prope nuclear "spin".

The number of spin states is $2I + 1$, where **I** is th number.

F^{19}
P = 9 / N = 10
odd

^2H
P = 1 / N = 1
atomic number odd

^1H
P = 1 N = 0
odd.

^{16}O
P = 8 / N = 8
not work
even

^{14}N
P = 7 / N = 7
atomic number odd

^{13}C
P = 6 / N = 7
mass number odd

^{12}C
P = 6 / N = 6
not work
even

الملخص

اذا كان atomic number أو mass number الاثنين both even → not work (inactive)

مثل ^{16}O / ^{12}C

اذا واحد منهم odd رح يتحسس على جهاز NMR

active كلهم H^1 / N^{14} / C^{13} / H^2 / F^{19}

العنصرين اللي H^2 / C^{13}

رح احلاهم بال NMR

باقي العناصر تعتمد على الطاقة

Table. General rules for determination of nuclear spin quantum nu

Mass Number	Number of Protons	Number of Neutrons	Spin (I)
Even	Even	Even	0
	Odd	Odd	Integer (1,2
Odd	Even	Odd	Half-Integer (1/
	Odd	Even	Half-Integer (1/

IR → qualitive نوعي ما بقدر احسب conc.

NMR → qualitive نوعي " " "

باقي العناصر تعتمد ع الطاقة

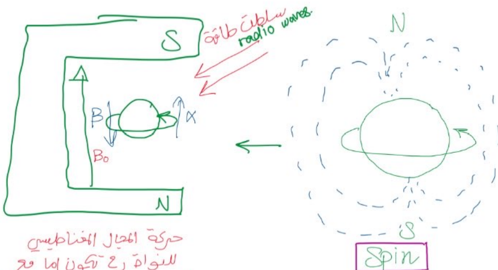
حكا ممكن يجيب عليهم سؤال

IR ← qualitive نوعي مابقدر احسب conce.

NMR ← qualitive نوعي " " "

UV ← both نوعي وكمي

mass ← both. نوعي وكمي



حركة المجال المغناطيسي للنواة رح تكون اما مع المغناطيس او عكس فقط

α ← مع

β ← عكس

* بجيب طاقة (radio waves) رح تعكس حركة magnetic feild (flip)

α ⟵ رح تصير β

β ⟵ بتصير α

لما اشيل هاي الطاقة رح يرجع متل ما كان.

يصنع مجال مغناطيسي بشكل عشوائي حتى الي بهم بدخله ع مجال مغناطيسي آخر بسلط عليه magnetic feild.

كشف الطاقة

* كم الطاقة اللازمة لقلب α الى β او العكس ؟

$$\Delta E = h\nu = \frac{\gamma}{2\pi} B_0$$

ثابت

$\pi \rightarrow \frac{22}{7}$

المغناطيس الي انا حاطيته

Atoms active in

I = 1/2: ^{1}H, ^{13}C, ^{19}F, ^{31}

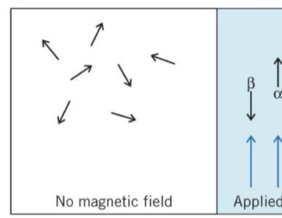
I = 1: ^{2}H, ^{14}N

I = 3/2: ^{15}N

Atoms not act

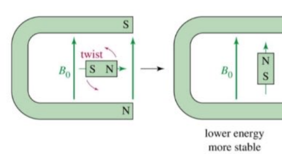
NMR

I= 0: ^{12}C, ^{16}O



(a)

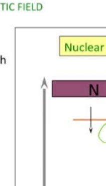
Behavior of spinning with external magne



(α-spin state)

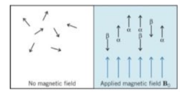
THE NUCLEUS IN A MAGNETIC FIELD

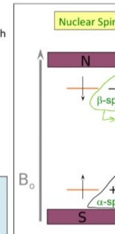
When nuclei are exposed to external magnetic field of strength B_0, their spins line up parallel to the applied field, either spin aligned (α-spin state) or spin opposed (β-spin state) to the external field.



THE NUCLEUS IN A MAGNETIC FIELD

When nuclei are exposed to external magnetic field of strength B_o, their spins line up parallel to the applied field, either spin aligned (α-spin state) or spin opposed (β-spin state) to the external field.





In a strong m
the two spin
en

$$E_{+1/2} = \frac{-\gamma(+\frac{1}{2})h\,B_o}{2\pi}$$ ← magnetic field

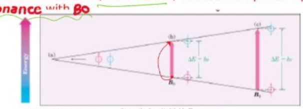
$$E_{+1/2} = -\frac{\gamma h}{4\pi} B_o$$

$$E_{-1/2} = +\frac{\gamma h\,B_o}{4\pi}$$

$$\Delta E = \underset{\beta}{\frac{\gamma h B_o}{4\pi}} - \underset{\alpha}{\frac{-\gamma h B_o}{4\pi}} = \frac{\gamma h B_o}{2\pi}$$

ΔE and Magnet Streng

The energy difference between aligned (α) and opposed (β) to th
generally small and is dependent upon Bo
Applied EM radiation (radio waves) causes the spin to flip
resonance with **Bo**



$$\Delta E = \cancel{h}\nu = \frac{\gamma}{2\pi} B_0$$

B_o = external
γ = gyromagn
^1H = 26,752 s
^{13}C = 6.7 s^{-1}gaus

. In a 14,092 gauss field, a 60 MHz (60,000,000) photon is required to fl
proton. from α to β

15MHz → ^{13}C

. Low energy, radio frequency.

هسا عرفنا كم الطاقة اللازمة لقلب البروتون • 60MHz / كربون 15MHz

حسبتهم من القانون تطبيقه مباشر

Magnetic Shieldi

O ← H → unsheild low r
C ← H → more r

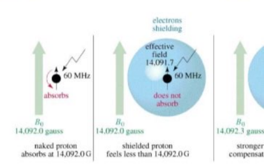
If all protons absorbed the same amount
magnetic field, not much information could be

But protons are surrounded by electrons that
external field.

Circulating electrons create an induced magne
the external magnetic field.

Shielded Protons

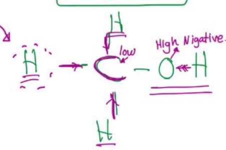
Magnetic field strength must be incre
shielded proton to flip at the same frequ



Protons in a Molecule

$\boxed{CH_3OH}$

(60MHz) radio waves.
سقطنا عليه



C ← H الطاقة اللي ح توصل بحالة الى النواة
Sheilded ← نسبة من هاي الطاقة ح تقدم
need more energy. جازة اللي حولين البروتون .

O ⟵ H اما لو سقطتها ع
فارح يصدم لانه O سحبت
إلكترونات البروتون .
هاي الحالة deshielded
مش محمية .

عبارة عن 3H
H – C
H – O ← 1H

Rules.

① more electronegativity ← ح يسحب الالكترونات اكثر ← ح يصير deshielded أكثر .

$\boxed{N < O < F}$

F
Cl
Br
I
more

② كل ما زاد عدد electronegativity زاد deshielded

$CHCl_3 > CH_2Cl > CH_3Cl$

← more deshielded.

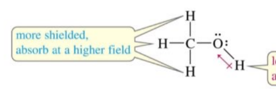
اكثر لليسار ع الرسمة .
الرسمة (curve)
يعتمد ع chemical shift
ويقاس بوحدة ppm
قانونه

$$\boxed{\delta = \frac{V_H - V_{TMS}}{V_{NMR} * 10^6}}$$

وهو ثابت Constant

Protons in a Molecule

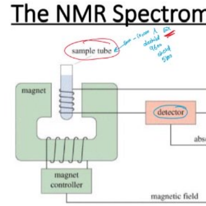
Depending on their chemical environme
a molecule are shielded by different amo



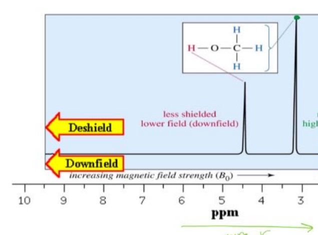
NMR Signals

- The number of signals shows how many differ are present.
- The location of the signals shows how shielde proton is.
- The intensity of the signal shows the numbe type. area under each peak.
- Signal splitting shows the number of protons o

The NMR Spectrome



The NMR Graph

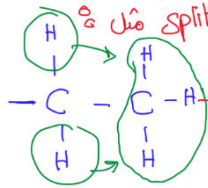


Tetramethylsilan

CH_3

تستخدم لحساب كم عدد
[N+1] peak ← تستخدم فقط
(linear + for sigma bond)

- سبب انقسام ال "one peak"
لأكثر من peak
هو تأثير H اللي على الجزيء المجاور
سبب splitting مثل:



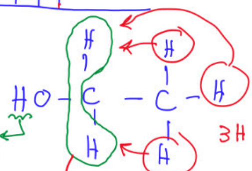
هول ال H عندهم نفس الظروف (النوع نفسه)

molecule اللي جنبه عليه 2H

هدول H (تعملو بولدوا spin magnetic field ممكن يكون مع أو عكس)

لـ عنا 3peak حسب المثال

N+1
2+1 = 3 peaks
triplet

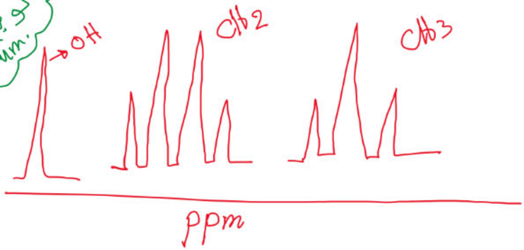


هاي حالة خاصة ما تتأثر على H اللي جنبهم.

3H

3+1 = 4 peaks

لو بدي اتشوف المركب as spectrum.



If a signal is
N + 1 peak

Relative Peak In
Number of Equ *Protons Causing*
0
1
2
3
4
5
6

Ran

- Equivalent

كنا نحسب peak splitting for linear

عن طريقة N+1 rule

*عنا حالة بكون فيها double bond

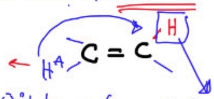
مابقدر اني احسب عن طريقة N+1

- لأنه double bond ما بتقدر تعمل rotation

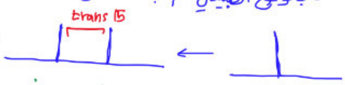
وجود H ع adjacent molecule

بجالنا coupling ← بقسمنا الـ peak لـ doupt

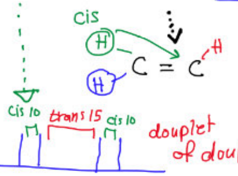
مثلاً



هاد بالوضع الطبيعي / بعد ما اثرت عليها H



بالنسبة للـ distance ←
كل ما كانت H أبعد بتعمل coupling لمسافة أبعد

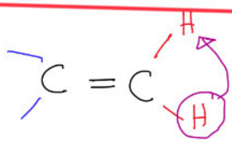


douplet of douplt

*سؤال - المسافة بين 2peak 10 ومسافة بين another 2peaks 15

مين رح يكون الـ trans ؟

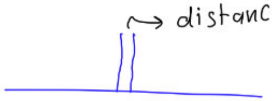
مسافة أكبر 15



موجودين ع نفس carbon

بس بهاي الحالة رح يعملوا coupling

لأنه وجود double bond خلاهم مش Equivalent



• Distance

• Measure

• Not dep

• Multiple adjacent

same

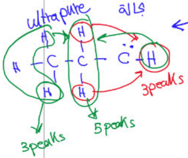
coupling

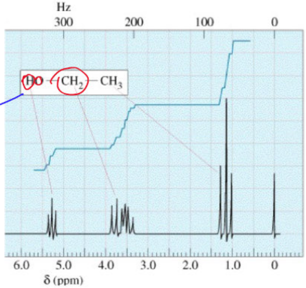
H

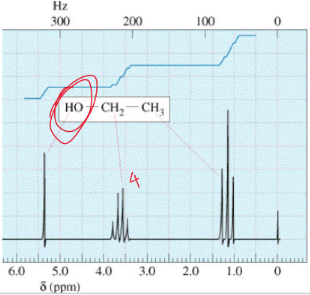
H

OH الحالة اللي H الموجودة ب.
رح تعمل splitting

Hydroxyl Proton







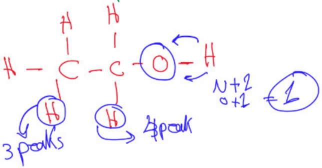
99.9% pure

- Ultrapure samples of ethanol show splitting.

→ O بحالة هاي
→ بتصير كانها C

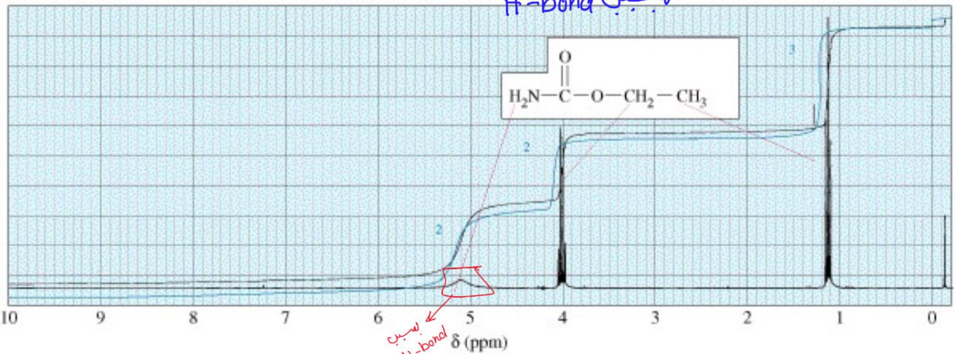
- Ethanol with a small amount of acidic or basic impurities will not show splitting.

→ not pure.



N-H Proton

- Moderate rate of exchange.
- Peak may be broad. → peak الها بكون وتصير بسبب H-bond



Identifying the O-H or N-H Peak

- Chemical shift will depend on concentration and solvent.
- To verify that a particular peak is due to O-H or N-H, shake the sample with D_2O → بضيفه حتى اعرف اذا عنا OH او NH

  ← بضيف هاي حتى اميز peak عن Impurities OH/NH
- Deuterium will exchange with the O-H or N-H protons.
- On a second NMR spectrum the peak will be absent, or much less intense.

رح تختفي البيك او رح يصير أقصر ← بدل انو هاي ال peak كانت H-bond ← يعني عنا OH / NH

اذا صفت D