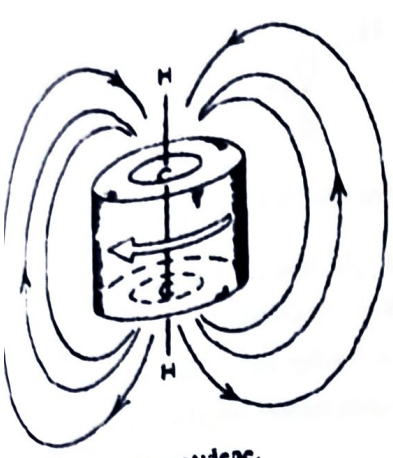
عدم التجانس المغناطيسي Magnetic Anisotropy

تمتلك بروتونات حلقة البنزين ازاحة كيميائية كبيرة 7-8δ مقارنتان مع بروتونات مجموعة الفنيل و الالكين و الالكاين و الالديهايدات و هذة حقيقة غير متوقع و السبب هو وجود الكترونات π بالقرب من البروتونات وهذة الالكترونات تحت تاثير المجال الخارجي تدور وتشكل تيار الحلقة الذي يولد مجال مغناطيسي معاكس للمجال الخارجي وان بروتونات الحلقة تكون معرضة الى ثلاث مجالات مغناطيسية الاول فهو الاقوى و هوالمجالخارجي المسلط و الثاني مسلط من منقبل دوران الكترون التكافؤ في ذرة هيدروجين و المجال الثالث ناتيء من عدم تجانس دوران الكترونات الحلقة و عدم التجانس هذ يؤدي الى تعرية ذرات الهيدروجين و عدم حجبها بشكل كبير و بتالي تكون الازاحة كبيرة

لناخذ مثال الاستلين C_2H_2 الجزيء ، خطي ، و اصرتة الثلاثية متناظرة حول المحور اذا اصطفى المحور مع المجال المغناطيسي فان الالكترونات π سوف تدور بزاويا عمودية على المجال المسلط فتحث بذلك مجال مغناطيسي معاكس للمجال المسلط و بما ان البروتونات تقع على المحور المغناطيسي فان الخطوط المغناطيسية للقوة المحثة من قبل الالكترونات الدائرة تعمل على حجب البروتونات وبذلك تجعل قمة ال MNR في موقع من المجال اعلى مما نتوقعة من السالبية الكهربائية



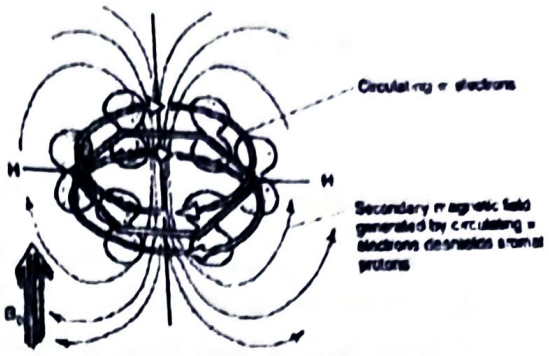
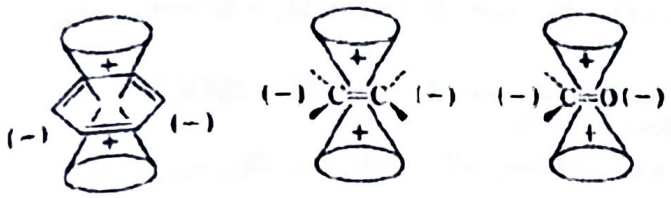


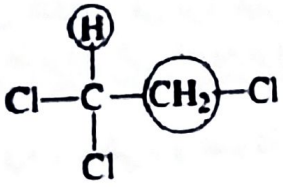
FIGURE 3.21 Diamagnetic anisotropy in benzene.

netic anisotropy in acetylene.



انشطار خطوط الرنين بسبب ذرات الهيدروجين المتجاورة (spin-spin-splitting)

اذا نظرنا الى طيف المركب 1,2,2-Trichloroethane ($C_2H_3Cl_3$) شاهدنا نوعين من البروتونات زوجا من البروتونات على ذرة الكاربون رقم 2 و بروتون واحدا على ذرة الكاربون رقم 1



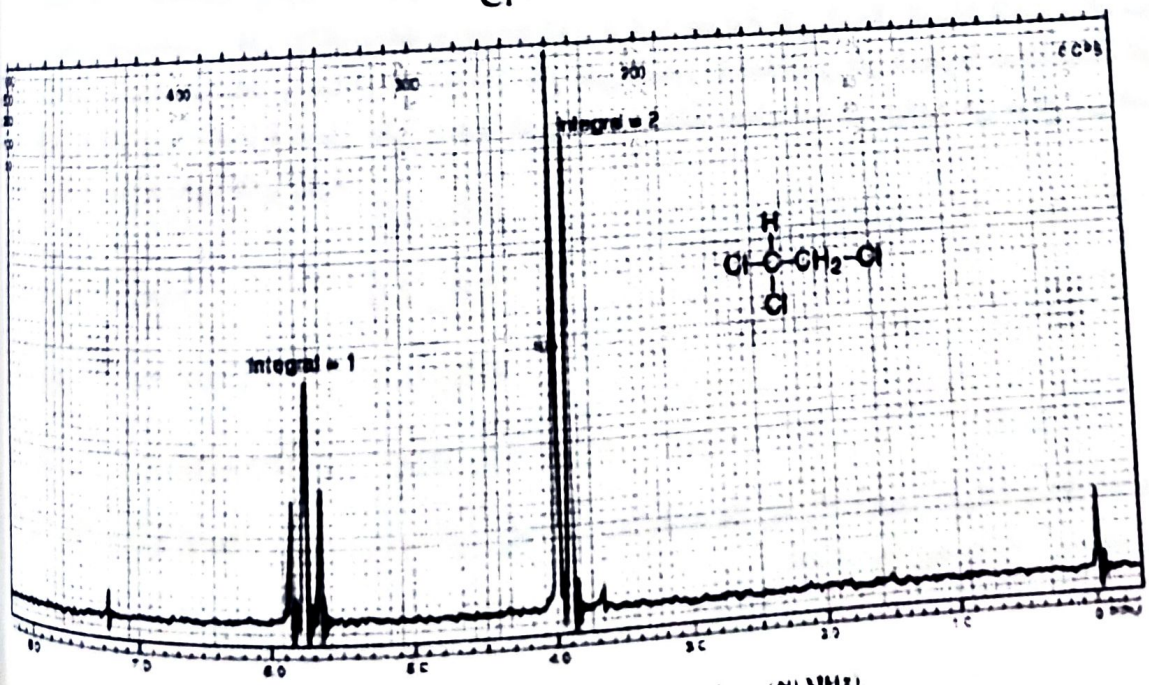


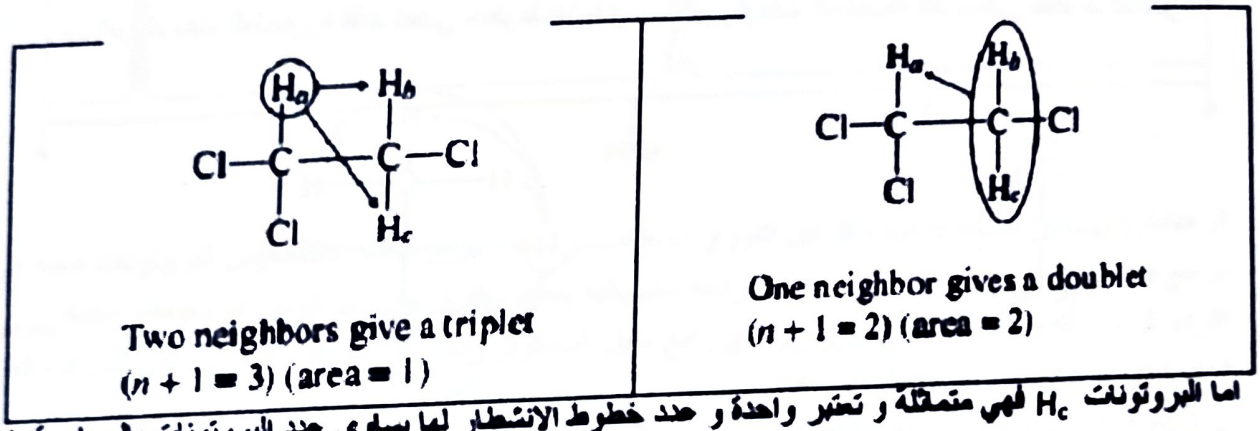
FIGURE 3.25 The ^{1}H NMR spectrum of 1,1,2-trichloroethane (90 MHz).

نسبة مساحة القمم (integral ratio) هي 2/1 و تتناسب مع عدد البروتونات حيث على ذرة الكاربون رقم 2 بروتونان و على ذرة الكاربون رقم 1 بروتون واحد لنفرض ان مقادير ارتفاع البروتونات H_b من عملية integration يساوي ٤سم و مقدار ارتفاع بروتون H_a من integral يساوي 2سم فيكون نسبة الارتفاع

$H_b/H_a = 4cm/2cm=2cm$

اي ضعف لان عدد بروتونات H_b هي ضعف بروتونات H_a البروتونات H_a يعطي قمة منشطرة الى ثلاث خطوط بسبب تاثرة بالبروتونات $2H_b$ المجاورة حيث تنص القاعدة (n+1) على ان عدد الخطوط الانشطار

تساوي عدد البروتونات المجاورة زائد واحد



اما البروتونات H_c فهي متماثلة و تعتبر واحدة و عدد خطوط الانشطار لها يساوي عدد البروتونات بالمجاورة زائد واحد اي بروتون و احد و هو H_a اذان ١+١=٢ و مما تقدم نستنتج اعلاقة البسيطة هي ان عدد الخطوط لبروتون ما تساوي عدد البروتونات المجاورة +١ فمثلا طيف الامتصاص يوديد الاثيل CH_3CH_2I

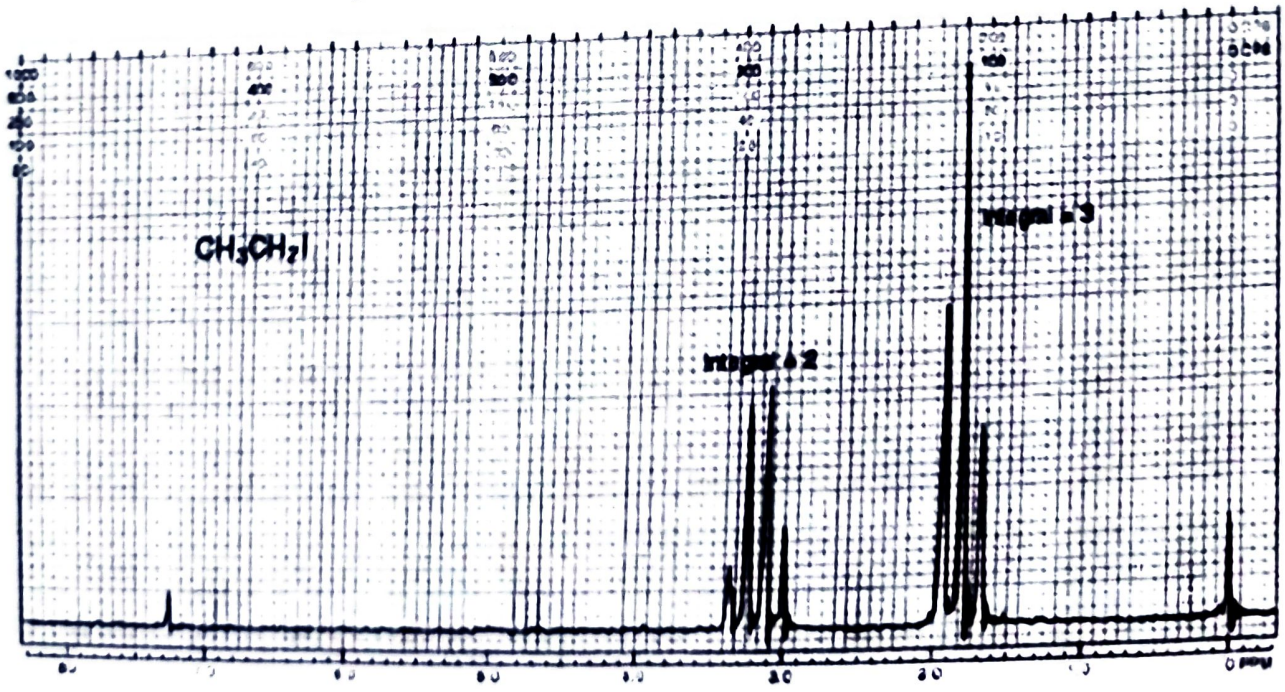


FIGURE 3.26 The HNMR spectrum of ethyl iodide (60 MHz).

ان سبة ارتفاع القمم كنسبة عدد البروتونات في المجاميع وان مجموعة المثلين تظهر في مجال مغناطيسي واطىء بسبب ارتباطها بذرة هالوجين ساحبة للالكترونات و مجموعة المثيل تظهر في مجال مغناطيسي عالي لان الكثافة الالكترونية عليها تكون اكثر لعدم ارتباطها بذرة ساحبة وان مجموعة CH_2 تعطي اربعة خطوط وذلك حسب القاعدة ثلاث ذرات هيدروجين مجاورة زائد ١ يساوي 4 اما مجموعة المثيل CH_3 فانها تعطي ثلاث خطوط بسبب مجاورتها لبروتونين و حسب القاعدة 1+2=3

توجد اربع حالات لدوران بروتونات CH_3 او اربع طاقات مختلفة تؤدي الى شطر قمة CH_2 الى اربعة خطوط او انشطارات بنسبة 1:3:3:1

انشطارات مجموعة CH_2 بسبب مجموعة CH_3

اربع حالات لدوران بروتونات CH_3 او اربع طاقات مختلفة تؤدي الى شطر قمة مجموعة CH_2 الى اربعة خطوط بنسبة 1:3:3:1

احتمالات دوران بروتونات مجموعة CH_3

↑↑↑ ↓↓↑ ↑↓↓ ↓↓↓

↑↓↑ ↓↑↓

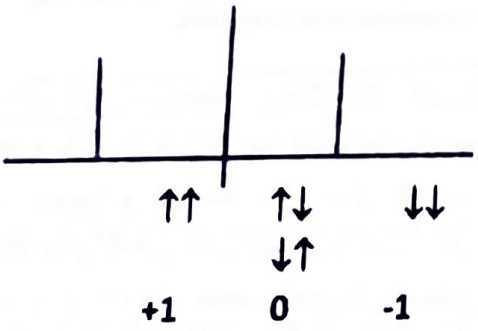
↓↑↑ ↓↓↑

+3/2 +1/2 -1/2 -3/2

ثلاث احتمالات لدوران بروتونات CH_2 او ثلاث طاقات مختلفة / 1- ,0, 1-

لنشطارات مجموعة CH_3 بسبب مجموعة CH_2

تؤدي الى شطر قمة امتصاص CH_3 الى ثلاث انشطارات بنسبة 1:2:1



قاعدة باسكل Pascal's Triangle

ان الشدات النسبية لقمم تعتمد على n فان قمم الثنائية doublet (n=1) هي بنسبة 1:1 و قمم الثلاثية tripletهي بنسبة 1:2:1اما الرباعية quartets بنسبة 1:3:3:1 وهذه التددية و الشدات النسبية يمكن الحصول من مثلث باسكل

Pascal's triangle.

Singlet	1
Doublet	1 1
Triplet	1 2 1
Quartet	1 3 3 1
Quintet	1 4 6 4 1
Sextet	1 5 10 10 5 1
Septet	1 6 15 20 15 6 1