## NMR原理

外加磁场时原子核自旋受限,产生能级分裂。

$$\Delta E = h 
u_0 = rac{h \gamma}{2\pi} B_0 \, .$$

## 仪器组成

分成连续性NMR波谱仪和脉冲傅里叶变换NMR波谱仪

#### 连续型

组成:磁铁,探头(样品池),射频发生器(光源),场频扫描单元、射频检测单元(检测器)、处理显示记录单元。

气动涡轮旋转装置: 使样品管在探头中, 沿纵轴向快速旋转, 消除磁场强度不均匀性的影响

#### 频场扫描单元

扫频: B不变,  $\nu$ 变化, 类似吸收光谱

扫场: 反之, 更常用。

#### 脉冲型

分析速度快, 灵敏度高W

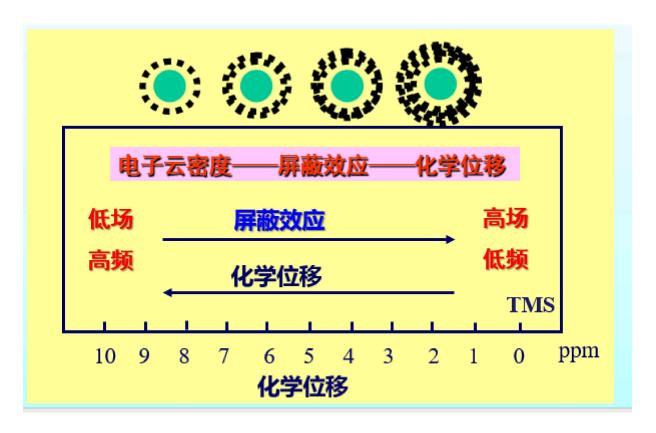
## 化学位移

原理:存在屏蔽效应  $B = (1 - \sigma)B_0$ 

定义:  $\delta = \frac{
u_{ ext{diff}} - 
u_{ ext{kill}}}{
u_{ ext{kill}}} imes 10^6 (ppm) = \frac{\Delta 
u}{
u} imes 10^6 (ppm) = \frac{B_{ ext{kill}} - B_{ ext{diff}}}{B_{ ext{kill}}} imes 10^6 (ppm)$ 

### 使用化学位移原因

- 1. 共振吸收频率相差很小
- 2. 采用比值消除B\_0影响,消除仪器因素,使\delta 有可比性



### 影响化学位移的因素

- 1. 诱导效应
- 2. 共轭效应
- 3. 磁各向异性

# 自旋耦合

产生原因:相邻两个氢核之间的自旋耦合

## 耦合常数

用来衡量耦合作用的大小

影响因素:核间距、角度、电子云密度,与B0无关

## 解谱

碳基、醛基、羧酸

## 耦合常数计算?

