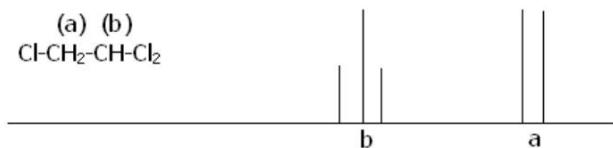


ازدواج الحركات المغزلية Spin-Spin coupling

مما سبق نجد أن الكثافة الأليكترونية حول البروتون والتوزيع الفراغي لذرات الهيدروجين في الجزء هى التي تحدد مواضع الانتقال الكيماوى chemical shift ، ولكن لماذا نجد بعض الأماتصاصات singlet والبعض الآخر triplet وهكذا؟

في الحقيقة نجد أن بعض الإماتصاصات الرئيسية تنقسم داخلياً إلى عدة إماتصاصات وترجع هذه الإنقسامات إلى التأثير المغناطيسي المتبادل بين البروتونات المجاورة والغير متكافئة أي إلى ما يسمى بالإزدواج المغزلى spin-spin coupling وهذا التأثير المتبادل بين البروتونات المجاورة يتم خلال الأليكترونات الداخلية في تركيب الروابط التي تربط بين البروتونات ، وبؤدي هذا التأثير المتبادل إلى إنقسام الإماتصاصات الناتجة من كل نوع من البروتونات إلى عدة إنقسامات ، وبنوقف عدد هذه الإنقسامات على عدد ذرات الهيدروجين المجاورة ، ويمكن شرح ازدواج الحركات المغزلية بالنظر إلى طيف الرنين النووي المغناطيسي لمركب ثلاثي كلورو إيثان 1, 1, 2-trichloro ethane حيث يظهر إماتصاصين لهذا المركب ، إماتصاص الأول ثالثي triplet ويظهر عند قيمة انتقال كيماوي 3.95 ، أما إماتصاص الثاني يكون ثلاثي 5.77 ولكن لماذا ظهر بروتونات (b) ثلاثة إماتصاص بينما بروتونات (a) ثنائية إماتصاص؟ يفسر ذلك كما يلى:



إذا نظرنا إلى ذرتى الهيدروجين a (بروتونى a) الاثنين ورمزا إلى البروتون الأول (á) والبروتون الثانى (â) نجد أن تأثيرهما على هيدروجين (b) (بروتون b) المجاور يكون على النحو التالي:

- 1- كلا بروتوني a متوازيان مع المجال المغناطيسي أي في نفس الاتجاه Both parallel
- 2- أحدهما يوازي المجال á Parallel والآخر عكس المجال á antiparallel
- 3- أحدهما يوازي المجال á Parallel والآخر عكس المجال á antiparallel

مطياف الرنين النووي المغناطيسى

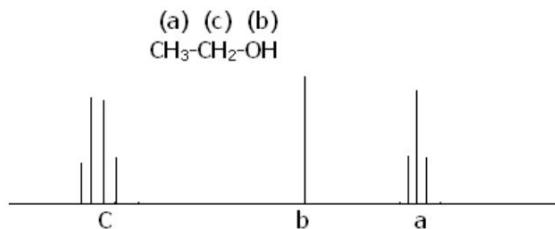
Both - كلا البروتونين غيرمتوازيان مع المجال المغناطيسى أى في عكس الاتجاه
antiparalle

وبما أن الحالة الثانية والثالثة متشابهة فيكون تأثيرهما متضاعف وعلى ذلك نجد أن
بروتون b يتآثر ثلاث مرات وبظهور ثلاثة امتصاصات بنسبة 1:2:1 بدلا من 1:1:1
وثابت الازدواج بينهما حوالي 6 cps

وعلى الجانب الآخر نجد أن بروتوني a & a' متكافئين وبالتالي يؤثر بروتون b الوحيد على
بروتونات a المكافئة باحتمالين فقط أما أن يكون مع المجال أو يكون ضد المجال ولذلك
نجد أن بروتوني a تظهر امتصاص ثانوي فقط وبنسبة متساوية 1:1 وثابت الازدواج
بينهما أيضا حوالي 6 cps

وأيضا نجد أن بروتونات (b) المجاورة لذرتين كلور تظهر رنين عند مجال منخفض down
field أي بعيدا عن TMS بالمقارنة ببروتونات (a) المجاورة لذرة كلور واحدة والتي تظهر
رنين عند مجال عالي up field ويرجع ذلك إلى أن قدرة ذرتين كلور على سحب
الأليكترونات أعلى من قدرة ذرة كلور واحدة وبالتالي فإن تعرية بروتونات b تكون أكبر
من تعرية بروتونات a فتظهر بروتونات b عند مجال منخفض بينما تظهر بروتونات a عند
مجال أعلى أي قريبا من TMS

طيف كحول الإيثanol

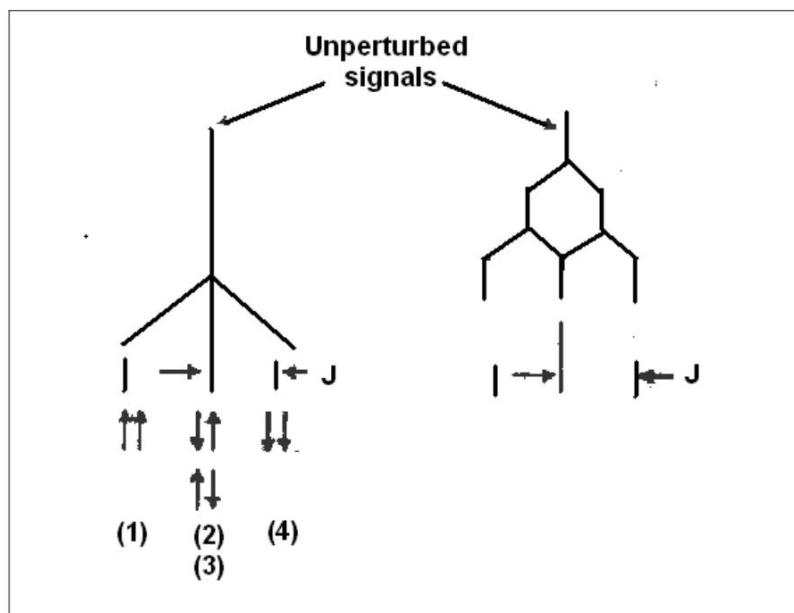


توجد طريقة أسهل في تقدير عدد الامتصاصات يمكن شرحها على النحو التالي:

1.22 تظهر مجموعة الميثيل (بروتونات a) امتصاص ثلاثي عند قيمة انتقال كيميائي ppm لأن جميع بروتونات مجموعة الميثيل متكافئة فيكون لها امتصاص واحد ولكنها

مطياف الرنين النووي المغناطيسى

تجاور ذرة كربون تحمل ذرتين هيدروجين فتؤثر كل ذرة من تلك الذرتين على امتصاص مجموعة الميثيل وتقسمه الى فسمين متساوين ويتدخل القسم الثاني والثالث معاً ليكون في النهاية نسبة التقسيم 1:2:1 كما هو موضح بالشكل (6-6).



شكل (6-6): نسبة التقسيم في كحول الايثايل Spin-spin splitting

أما مجموعة الميثيلين CH_2 (بوتونات C) المجاورة لمجموعة الميثيل CH_3 فانها لها امتصاص واحد لأنها تحمل بروتونين متكافئين ويتأثر هذا الامتصاص بثلاثة بروتونات مجموعة الميثيل فتقوم كل واحدة من بروتونات الميثيل بشق امتصاص مجموعة الميثيلين الى نصفين تتدخل هذه الانشقاقات حتى تعطي في النهاية امتصاص رباعي بنسبة 1:3:3:1.

ولسهولة توقع امتصاص أي مجموعة فانها هي نفسها لها امتصاص واحد يضاف اليها امتصاصات بعدد ذرات الهيدروجين التي تحملها ذرة الكربون المجاورة.

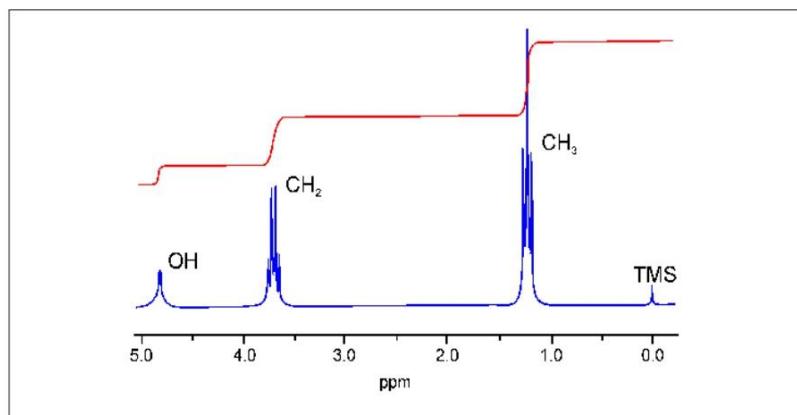
مطياف الرنين النووي المغناطيسى

أي أن عدد الامتصاصات للبروتونات الموجودة على أي ذرة كربون = عدد البروتونات التي تحملها ذرة الكربون المجاورة + 1

وبذلك يكون امتصاص مجموعة الميثيل في كحول الايثانول = 3 = 1+ 2

أما امتصاص مجموعة الميثيلين في كحول الايثانول = 4 = 1+ 3

أما امتصاص مجموعة الهيدروكسيل في كحول الايثانول = 1 لأن ذرة الأكسجين تحول دون ازدواج بروتون الهيدروكسيل مع البروتونات المجاورة (شكل 7-6).



شكل (7-6): طيف الرنين النووي لكحول الايثانول

ومن الجدير بالذكر أن قيمة ثابت الأزدواج (J) coupling constant لا تتغير بتغيير شدة المجال المغناطيسى الخارجى بعكس الأنقال الكيمائى الذى يتوقف على شدة هذا المجال.

يمكن تقسيم طيف الرنين المغناطيسى NMR بناء على قيمة ثابت الأزدواج (J) وكذلك قيمة الانقال الكيمائي (δ) إلى:

طيف الرتبة الأولى First order spectra

وفيه تكون قيمة δ بين المجموعتين اللتين يحدث بينهما الأزدواج المغزلى كبيرة ، ويكون عدد الانقسامات فى كل امتصاص رئيسى مساوباً ($n+1$) حيث n هى عدد ذرات