

# NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE SPECTROSCOPY (NMR)

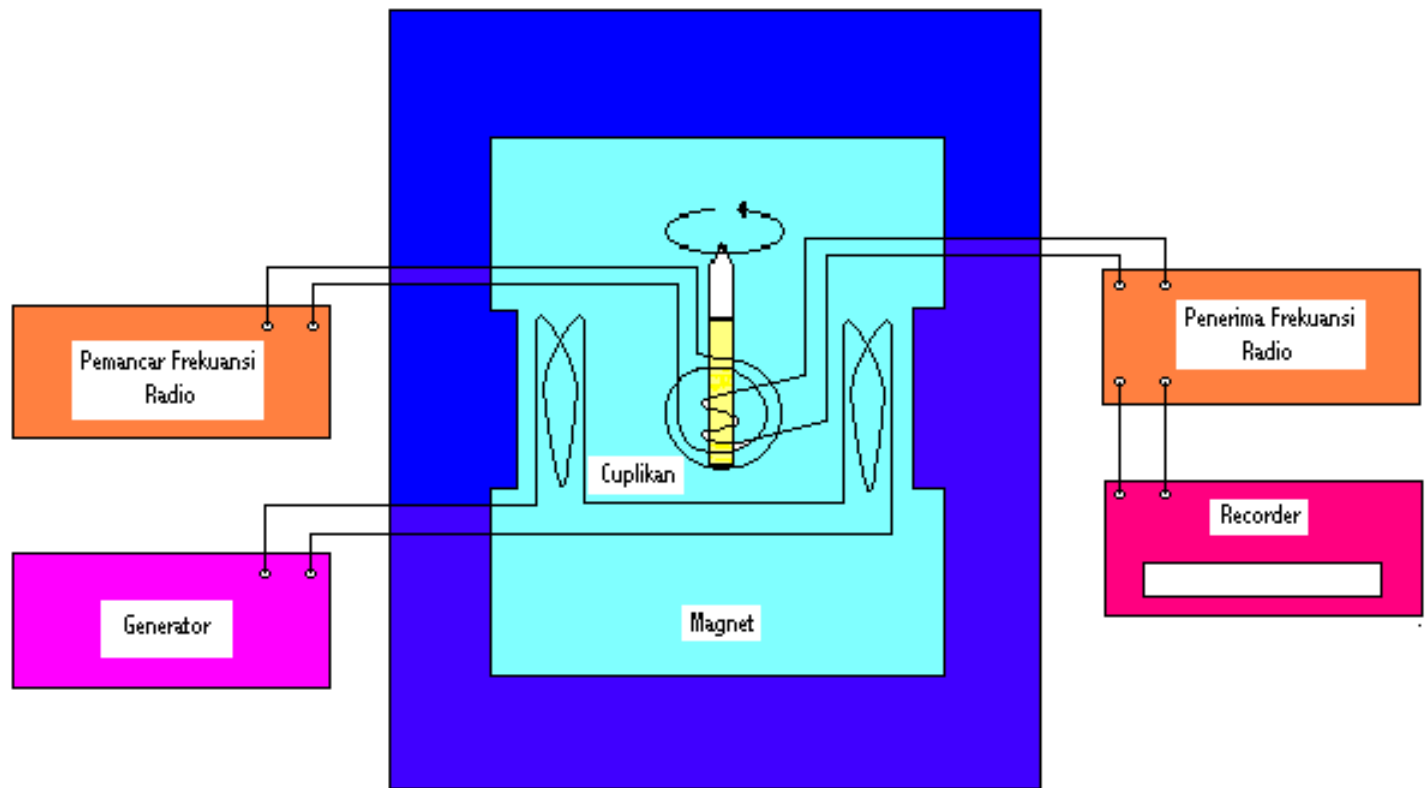




# Prinsip Dasar

**Pengukuran absorpsi radiasi elektromagnetik pada daerah frekuensi radio, 4 – 600 MHz ( $\lambda = 75 – 0,5$  m) oleh partikel inti atom yang berputar di dalam medan magnet.**

# Skema Alat NMR



Created by Hokcu



Tabel1. Bilangan Kuantum Spin Beberapa Inti

Jumlah		Bil. K Spin I	Contoh
Proton	Neutron		
Genap	Genap	0	$^{12}\text{C}$ , $^{16}\text{O}$ , $^{32}\text{S}$
Ganjil	Genap	1/2	$^1\text{H}$ , $^{19}\text{F}$ , $^{31}\text{P}$
		3/2	$^{11}\text{B}$ , $^{79}\text{Br}$
Genap	Ganjil	1/2	$^{13}\text{C}$
		3/2	$^{137}\text{I}$
Ganjil	Ganjil	1	

**N  
M  
R**

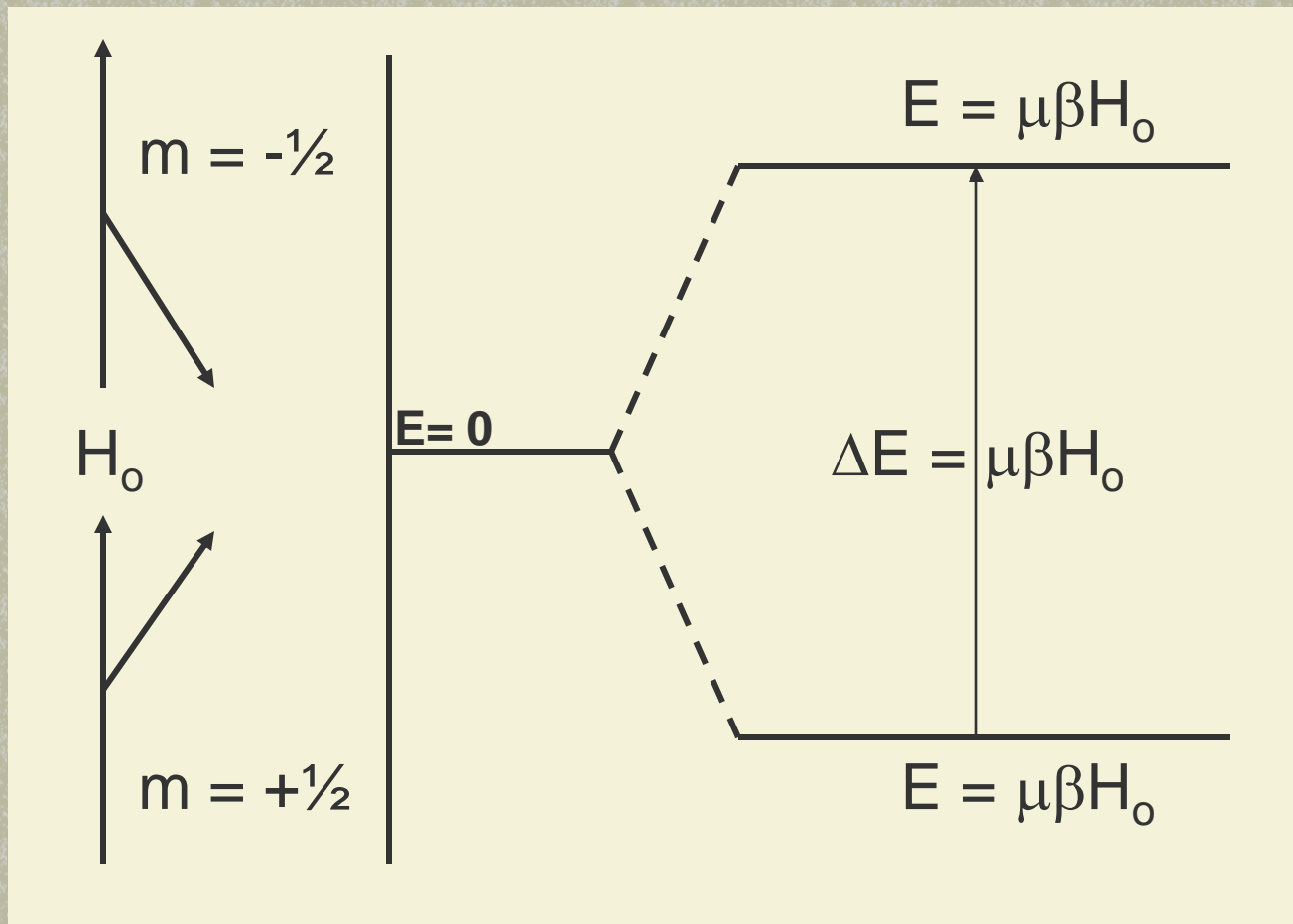
# Energi Kuantum

The diagram shows the equation for nuclear magnetic energy,  $E = -\frac{m\mu}{I} \beta N_o$ , with callouts explaining each term:

- Bil. Kuantum magnet**: Points to the  $m\mu$  term.
- Momen magnet proton = 2,7927 magnet inti**: Points to the  $\mu$  term.
- Bil. spin**: Points to the  $I$  term.
- Tetapan magnet inti =  $5,051 \times 10^{-34}$  erg G<sup>-1</sup>**: Points to the  $\beta$  term.
- Kekuatan medan magnet luar (G)**: Points to the  $N_o$  term.

A red arrow points from the top left towards the equation.

# Tingkat Energi Kuantum





## Contoh 1:

Beberapa alat NMR menggunakan magnet dengan kekuatan medan magnet ( $H_o$ )= 14,092 G. Pada frekuensi berapa inti atom akan mengabsorpsi energi R.E dalam medan magnet ini?

Jawab:

$$\Delta E = h \nu = 2 \mu \beta H_o \longrightarrow \nu = \frac{2 \beta H_o}{h}$$

$$\nu = \frac{2 \times 2,7927 \times 5,051 \cdot 10^{-24} \text{ erg G}^{-1} \times 14,092 \text{ G}}{6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ Hz}}$$

$$\nu = 60,0 \cdot 10^6 \text{ Hz} = 60,0 \text{ MHz}$$



# Persamaan Boltzmann

Perbandingan jumlah proton pada tingkat energi lebih tinggi ( $m = -\frac{1}{2}$ ) & tingkat energi lebih rendah ( $m = +\frac{1}{2}$ ).

$$\frac{N_j}{N_o} = e^{\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)}$$

Suhu  
(K)

Tetapan  
boltzmann  
( $=1,38 \cdot 10^{-16} \text{ erg K}^{-1}$ )



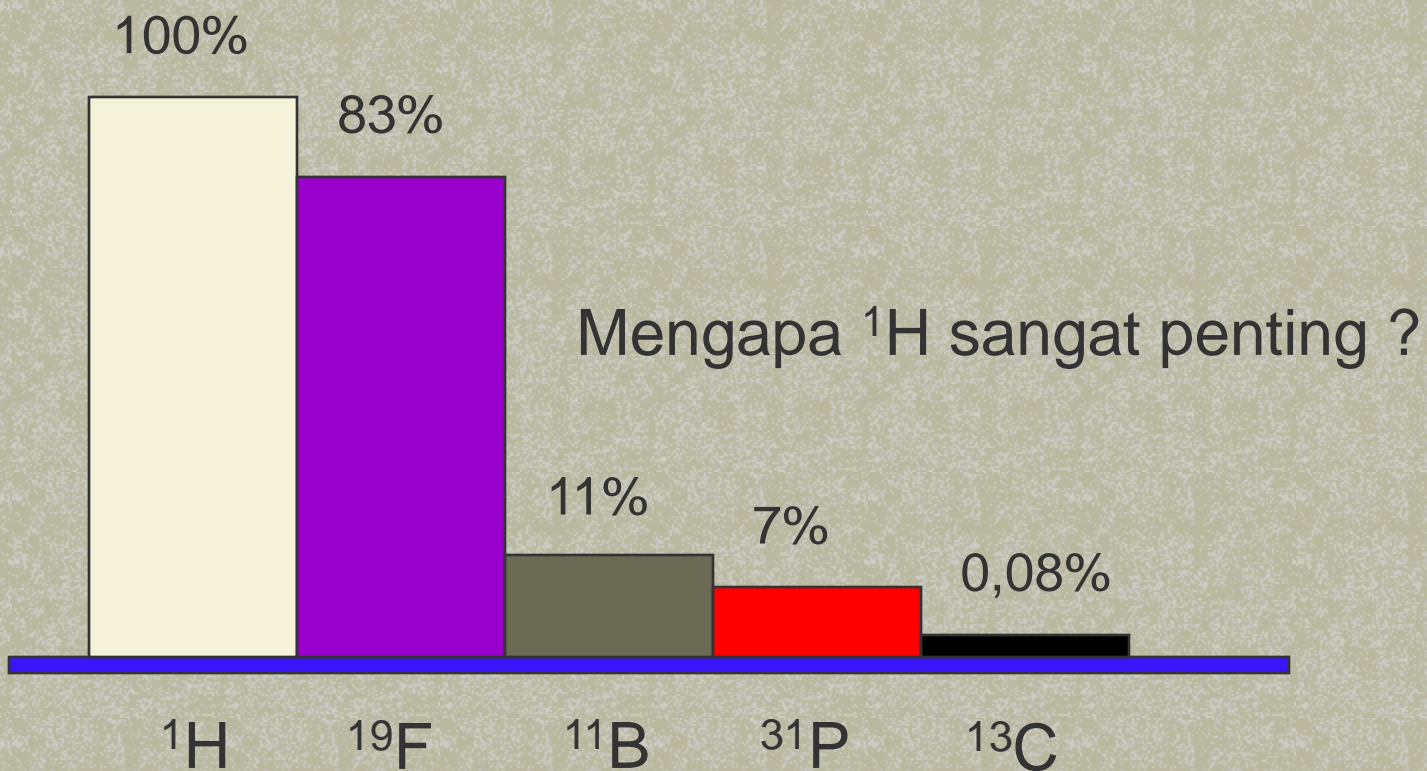


## Contoh 2:

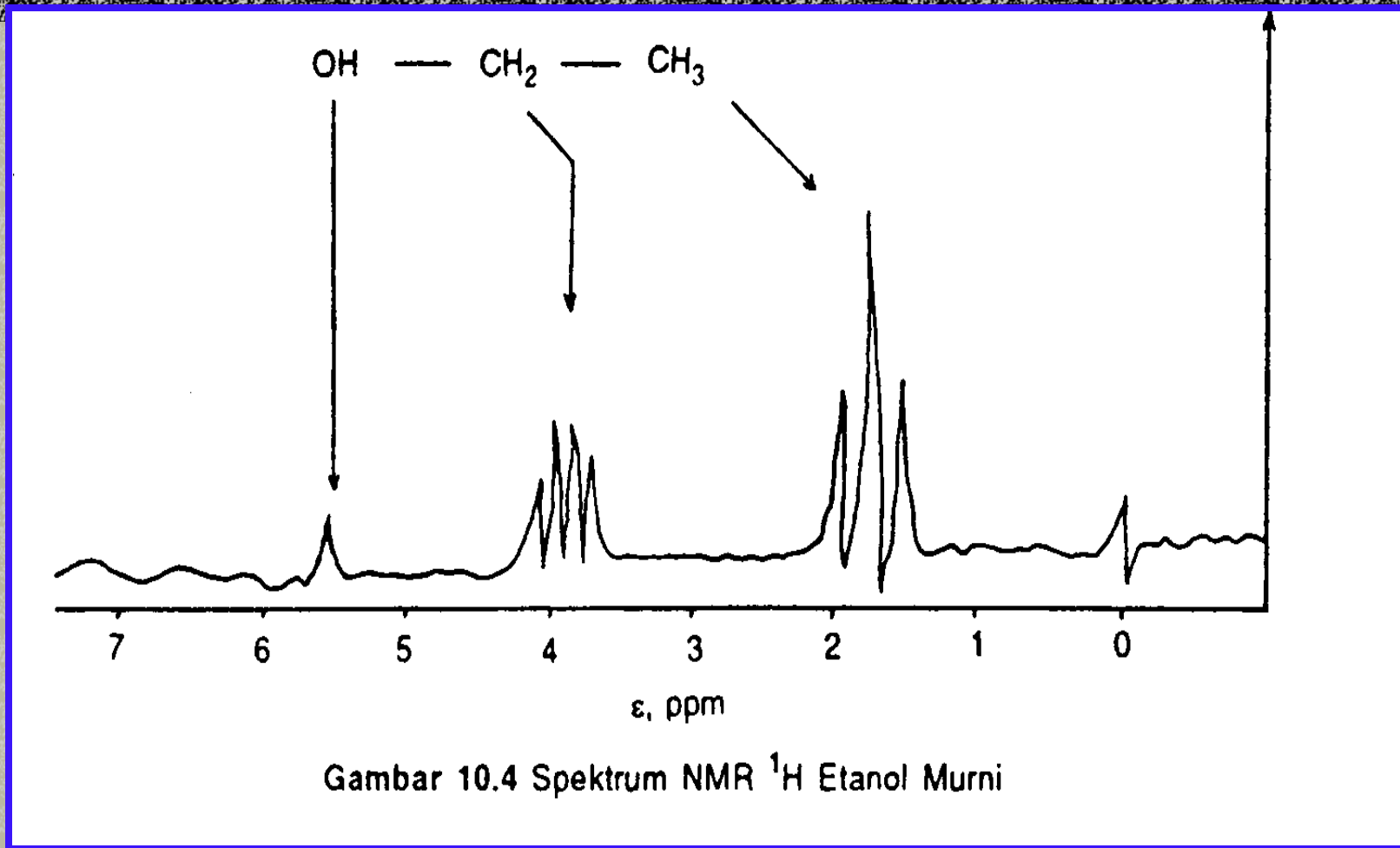
Hitung jumlah relatif proton pada tingkat magnet yang lebih tinggi dan lebih rendah bila cuplikan disimpan dalam medan magnet 14,0926 pada 20 °C.

Jawab:

$$\begin{aligned}\frac{N_j}{N_o} &= e^{\left(-\frac{2 \mu \beta H_o}{kT}\right)} \\ &= e^{\left(\frac{-2 \times 2,79 \times 5,051 \cdot 10^{-24} \times 14,092}{1,38 \cdot 10^6 \times 293}\right)} \\ &= e^{(-9,82 \cdot 10^{-6})} \\ &= 0,999\end{aligned}$$



Gambar 2. Lima macam inti untuk analisis NMR



Gambar 3. Spektrum H NMR untuk Etanol



# Mengapa TMS digunakan sebagai standar pembandingan?



## Mengapa spek. $^1\text{H}$ $\text{CH}_3$ tdp. Pada medan magnet Yang lebih kuat dari pada $\text{CH}_3$ dan $\text{OH}$ ?

- Makin rapat  $e^-$  di sekitar H makin besar energi yang diperlukan medan tinggi.
- Kerapatan e pada proton:  **$-\text{CH}_3 > -\text{NH} > -\text{OH} > \text{F-H}$**



## Mengapa peak $\text{CH}_3$ :triplet, $\text{CH}_2$ :quartet, OH: singlet?

Dipengaruhi jumlah proton tetangga dengan rumus  $N+1$  ( $N = \Sigma$  proton tetangga)

- $\text{CH}_3$  dipengaruhi  $\text{CH}_2$

- $\text{CH}_2$  dipengaruhi  $\text{CH}_3$ , sedang OH tidak dipengaruhi

-OH tidak dipengaruhi proton tetangga.

Perbandingan luas peak setiap rumpun



## Perbandingan luas peak setiap rumpun

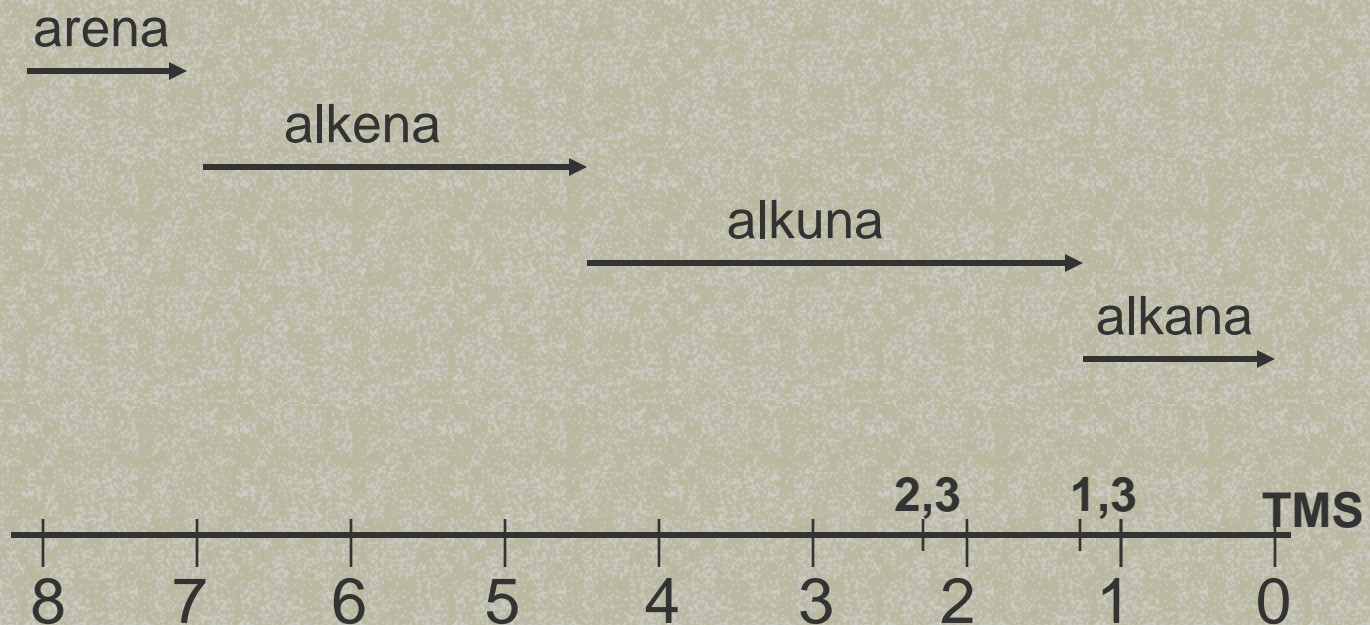
$\Sigma H$ tetangga	$\Sigma H$ peak	luas peak
0	1	1
1	2	1 : 1
2	3	1 : 2 : 1
3	4	1 : 3 : 3 : 1
4	5	1 : 4 : 6 : 4 : 1
5	6	1 : 5 : 10 : 10 : 5 : 1
6	7	1 : 6 : 15 : 20 : 15 : 6 : 1

*Puncak yang diharapkan*





## Perkiraan "**Chemical Shift**" NMR



Contoh 3:

Spektrum NMR  $^1\text{H}$  berikut untuk senyawa tak berwarna, cairan, berisomer, dan hanya mengandung C dan H. Tentukan struktur senyawa tersebut!

