

కేంద్రక అయస్కాంత అనునోద వర్ణపట శాస్త్రం

విభాగం-1

డా. టి. వర ప్రసాద్.

రసాయన శాస్త్ర విభాగాధిపతి.

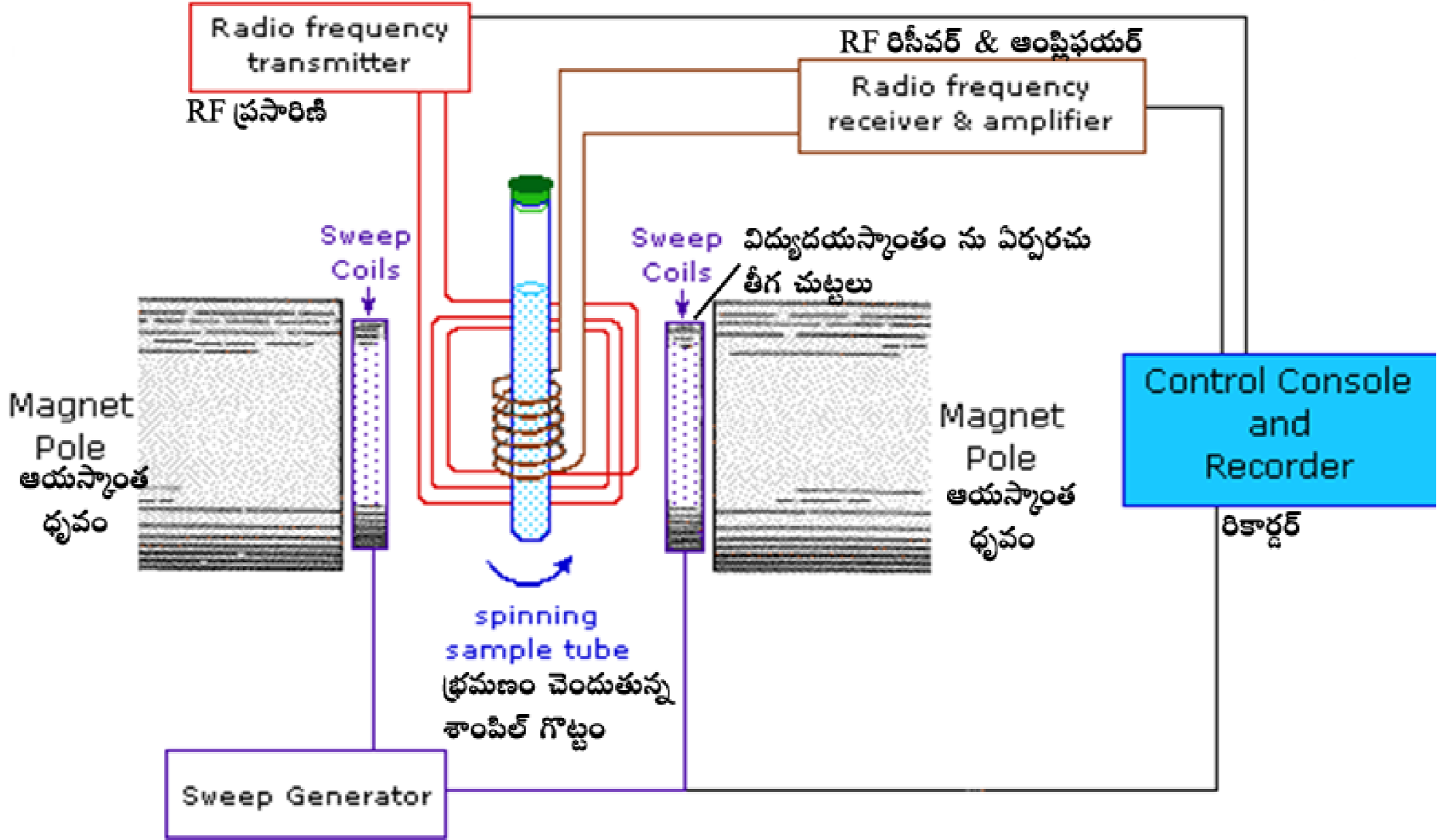
రసాయన శాస్త్ర అధ్యాపకులు.

పి. ఆర్. ప్రభుత్వ కళాశాల (స్వయంప్రతిపత్తి) , కాకినాడ.

Introduction

- కేంద్రక అయస్కాంత అనునాద వర్ణపట శాస్త్రం నే సంక్షిప్తంగా NMR వర్ణ పటశాస్త్రం అంటారు.
- అణు నిర్మాణం తెలుసుకొనుటలో ఇది కర్బన రసాయన శాస్త్రవేత్తలకు శక్తి వంతమైన సాధనం
- ఇసిడర్ ఐజాక్ రాబి అనే అమెరికన్ శాస్త్రవేత్త 1938లో మొట్టమొదట అణుపుంజంలో NMR శోషణను గుర్తించాడు.
- ఫెలిక్స్ బ్లాక్ మరియు ఎడ్వర్డ్ పురెల్ లు 1945లో ఈ టెక్నిక్ ను నీరు, పారఫిన్ వంటి ద్రవ మరియు ఘన పదార్థాలలో ఉపయోగించేట్లు విస్తృత పరచారు.
- 1970 లో Peter Mansfield, Paul Lauterbur లు ఈ టెక్నిక్ నుండి MRI స్కానింగ్ ని అభివృద్ధి చేసారు.

NMR స్పెక్ట్రోమీటర్ నందు పరికరాల ఏర్పాటు



సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

- ఎలక్ట్రాన్ వలే కొన్ని పరమాణు కేంద్రకాలు ఆత్మభ్రమణం చెందునట్లుగా భావిస్తారు.
- భ్రమణం చెందే కేంద్రకాలలో మనం ఎక్కువ అధ్యయనం చేసే కేంద్రకం సాధారణ హైడ్రోజన్ (^1H) కేంద్రకం.
- ^1H కేంద్రకంలో ఒకే ఒక ప్రోటాన్ ఉండును.
- అందువలన హైడ్రోజన్ యొక్క NMR వర్ణ పటాలను ప్రోటాన్ మాగ్నెటిక్ రెజోనేన్స్ (PMR Spectra) వర్ణపటాలంటారు.

సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

➤ భ్రమణం చేస్తున్న కేంద్రకం దాని అక్షం వెంబడి అయస్కాంత క్షేత్రంను ఏర్పరచును.

అనగా కేంద్రకం ఒక చిన్న దండయస్కాంతం వలే పనిచేయును.

➤ కేంద్రకం అయస్కాంతభ్రామకం $\mu_N = \gamma \frac{h}{2\pi} \sqrt{I(I + 1)}$

ఇక్కడ

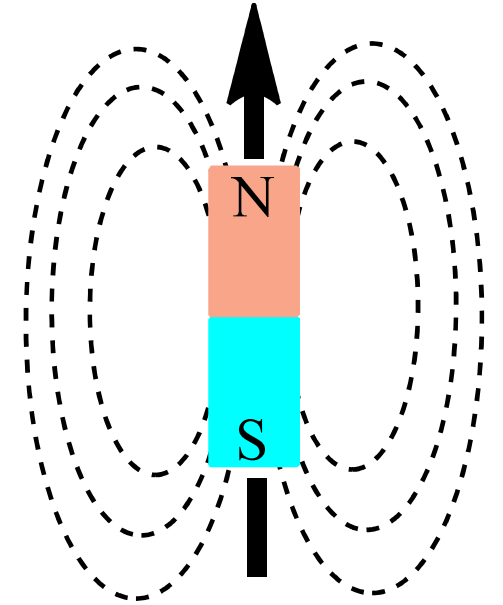
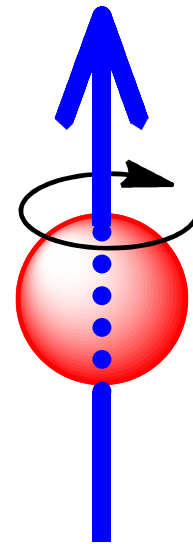
γ = గైరోమాగ్నెటిక్ నిష్పత్తి

h = ప్లాంక్ స్థిరాంకం

I = కేంద్రకం స్పిన్ (భ్రమణ) క్వాంటం సంఖ్య.

కొన్ని కేంద్రకాల I విలువలను

next slide లో చూడవచ్చు



సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

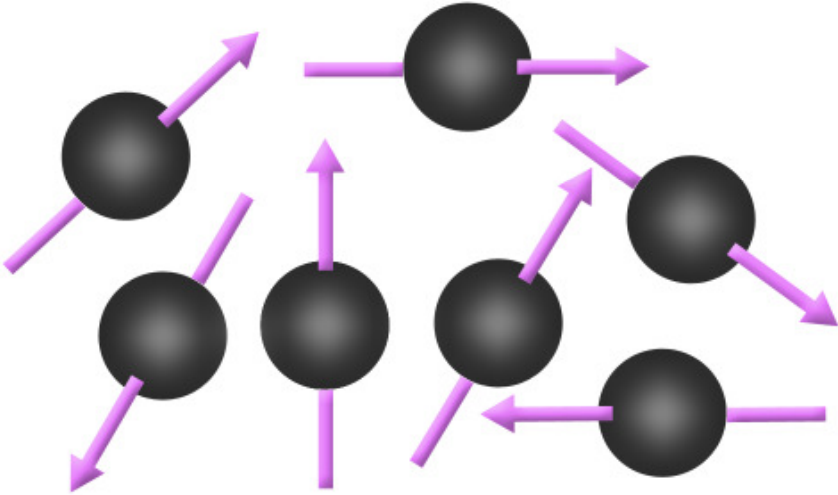
కొన్ని కేంద్రకాల స్పిన్ (భ్రమణ) క్వాంటం సంఖ్యలు

కేంద్రకం స్పిన్ క్వాంటం సంఖ్య (I) విలువ కేంద్రకం పరమాణు సంఖ్య మరియు ద్రవ్య రాశి సంఖ్య పై ఆధార పడును

పరమాణు సంఖ్య	ద్రవ్య రాశి సంఖ్య	I విలువ	ఉదాహరణ
బేసి సంఖ్య	బేసి సంఖ్య	భిన్నాంకం	^1H (I=1/2)
సరి సంఖ్య	బేసి సంఖ్య	భిన్నాంకం	^{13}C (I= 1/2)
బేసి సంఖ్య	సరిసంఖ్య	పూర్ణాంకం	^2H (I=1)
సరి సంఖ్య	సరిసంఖ్య	సున్నా	^{12}C (I=0)

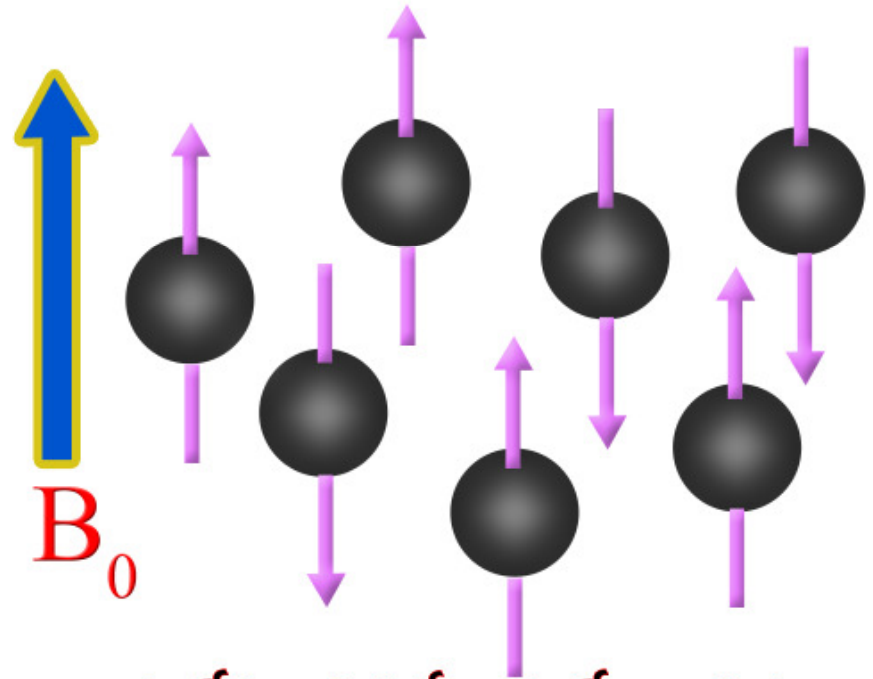
బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రంలో కేంద్రక అయస్కాంత భ్రామకాల విన్యాసం

బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రం లేనపుడు



క్రమరాహిత్యంగా అమరివున్న
కేంద్రక అయస్కాంతాలు

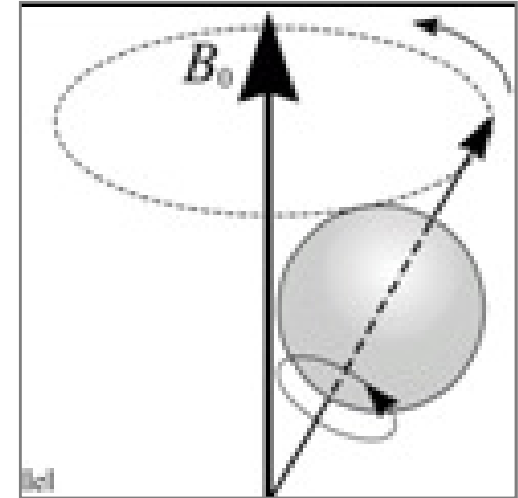
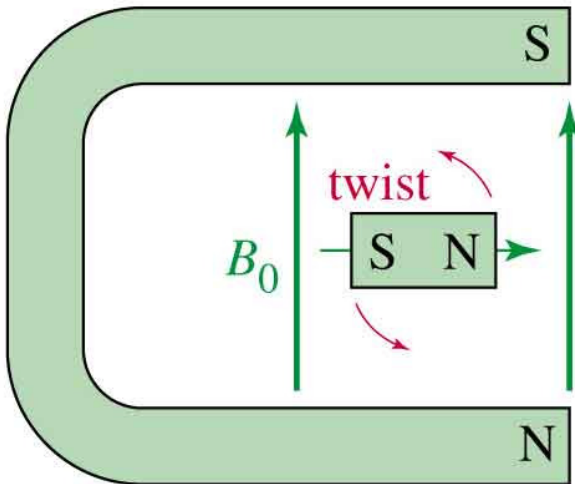
బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రం సమక్షంలో



బాహ్య క్షేత్ర దిశలో లేదా వ్యతిరేఖ దిశలో
దిగ్విన్యాసమును పొందిన కేంద్రక అయస్కాంతాలు

కేంద్రకం పురస్పరణం

- బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రంలో కేంద్రక అయస్కాంత భ్రామకం క్షేత్ర దిశలో లేదా వ్యతిరేఖ దిశలో విన్యాసంను పొందటమే కాక ఈ భ్రామకం బాహ్య క్షేత్ర అక్షం చుట్టూ కొంత కోణంతో భ్రమణం (precession) చేస్తుంది.
- ఇలాంటి భ్రమణంను పురస్పరణం అంటారు.
- కేంద్రకం పురస్పరణ పౌనఃపున్యంను లార్మర్ పౌనః పున్యం అంటారు.



సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

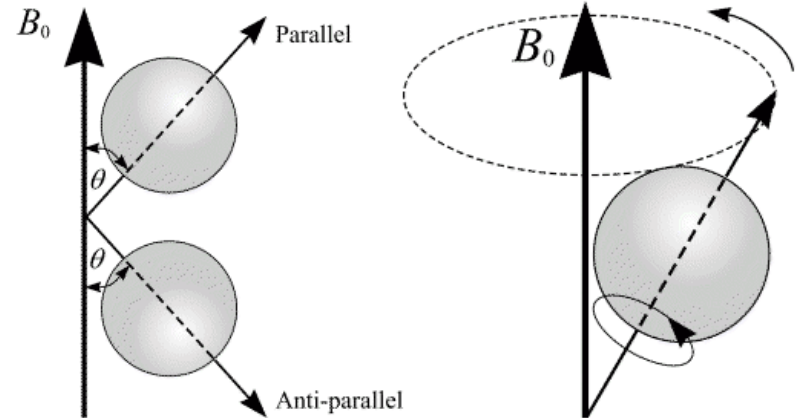
కేంద్రకం పురస్పరణం దిగ్విన్యాసాలు

- బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రంలో కేంద్రకాలు $(2I + 1)$ విలువకు సమానమైన భ్రమణస్థితులుగా దిగ్విన్యాసం పొందును.

- ఉదా: ^1H కి $I = 1/2$ కనుక $(2I + 1) = 2$

అందువలన ప్రోటాన్ పురస్పరణ భ్రమణం క్రింద తెలిపిన రెండు రకాల దిగ్విన్యాసాలలో దేనిని అయినా పొందవచ్చును. అవి

- (i) బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్ర దిశ
- (ii) బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్ర దిశకు వ్యతిరేఖ దిశ.



సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

బాహ్య క్షేత్రంలో ప్రోటాన్ స్థితి శక్తి

- ➔ బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రంలో ప్రోటాన్ స్థితి శక్తి (E_N) = $- B_0 \times \mu_N \cos \theta$

$$E_N = - B_0 \times \gamma \frac{h}{2\pi} \sqrt{I(I+1)} \cos \theta$$

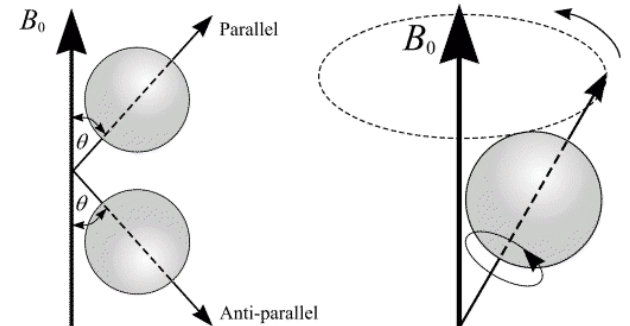
ఇక్కడ B_0 = బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్ర బలం, θ = పురస్పరణ కోణం

- ➔ క్వాంటం యాంత్రిక శాస్త్రం ప్రకారం పురస్పరణ కోణం (θ) కొన్ని నిర్దిష్ట విలువల్లోనే ఉండును.

- ➔ $\sqrt{I(I+1)} \cos \theta$ విలువ, కేంద్రకం అయస్కాంత క్వాంటం సంఖ్య (m_I) విలువకు సమానమయ్యేటట్లు ఉన్న కోణాల (θ)లో మాత్రమే కేంద్రకం పురస్పరణ అనుమతించబడును.

- ➔ $m_I = -I$ నుండి $+I$ వరకు 1 బేధం తో వచ్చే సంఖ్యలు

- ➔ ఉదా: $I = 1/2$ అయితే, $m_I = -1/2$ మరియు $+1/2$



సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

ప్రోటాన్ అయస్కాంత క్వాంటం సంఖ్యలు - దాని శక్తి స్థాయిలు

- ▶ అయస్కాంత క్వాంటం సంఖ్య విలువలకు అనుగుణంగా బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రంలో హైడ్రోజన్ కేంద్రకానికి (ప్రోటాన్ కు) క్రింది శక్తి స్థాయిలు ఉండును.

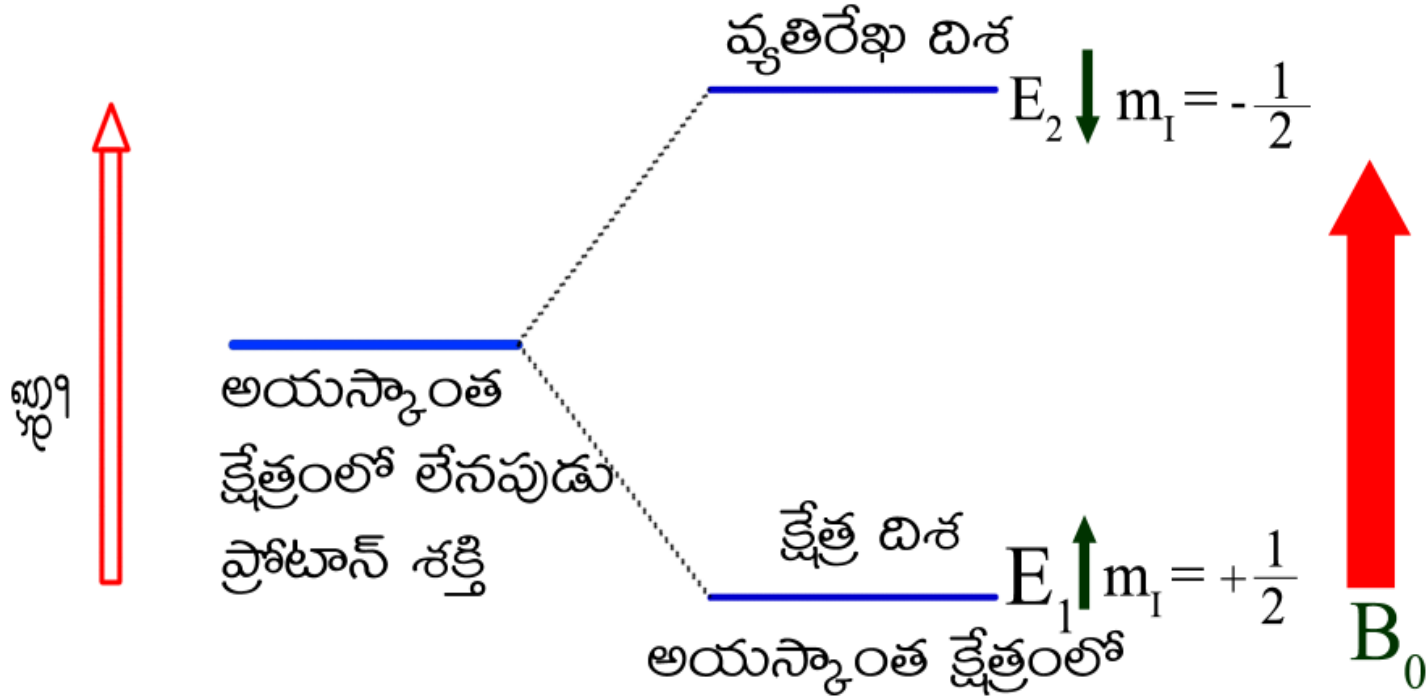
$$m_I = +\frac{1}{2} \text{ కి అనుగుణంగా, } E_1 = -\frac{1}{2} \times \frac{\gamma h}{2\pi} \times B_0$$

$$m_I = -\frac{1}{2} \text{ కి అనుగుణంగా, } E_2 = +\frac{1}{2} \times \frac{\gamma h}{2\pi} \times B_0$$

- ▶ పై రెండు శక్తి స్థాయిలను వరుసగా α శక్తి స్థాయి అని, β శక్తి స్థాయి అని అంటారు.
- ▶ ఈ శక్తి స్థాయిలనే భ్రమణ స్థితులు (spin states) అని కూడా అంటారు.

సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

బాహ్య క్షేత్రంలో ప్రోటాన్ శక్తి స్థాయిలు



బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రంలో ప్రోటాన్ శక్తి స్థాయిల విభజన

బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రంలో ప్రోటాన్ శక్తి స్థాయిలు

ఈ రెండు స్థాయిల మధ్య శక్తి భేదం $\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{\gamma h}{2\pi} \times B_0$

$$E_1 = -\frac{1}{2} \times \frac{\gamma h}{2\pi} \times B_0$$

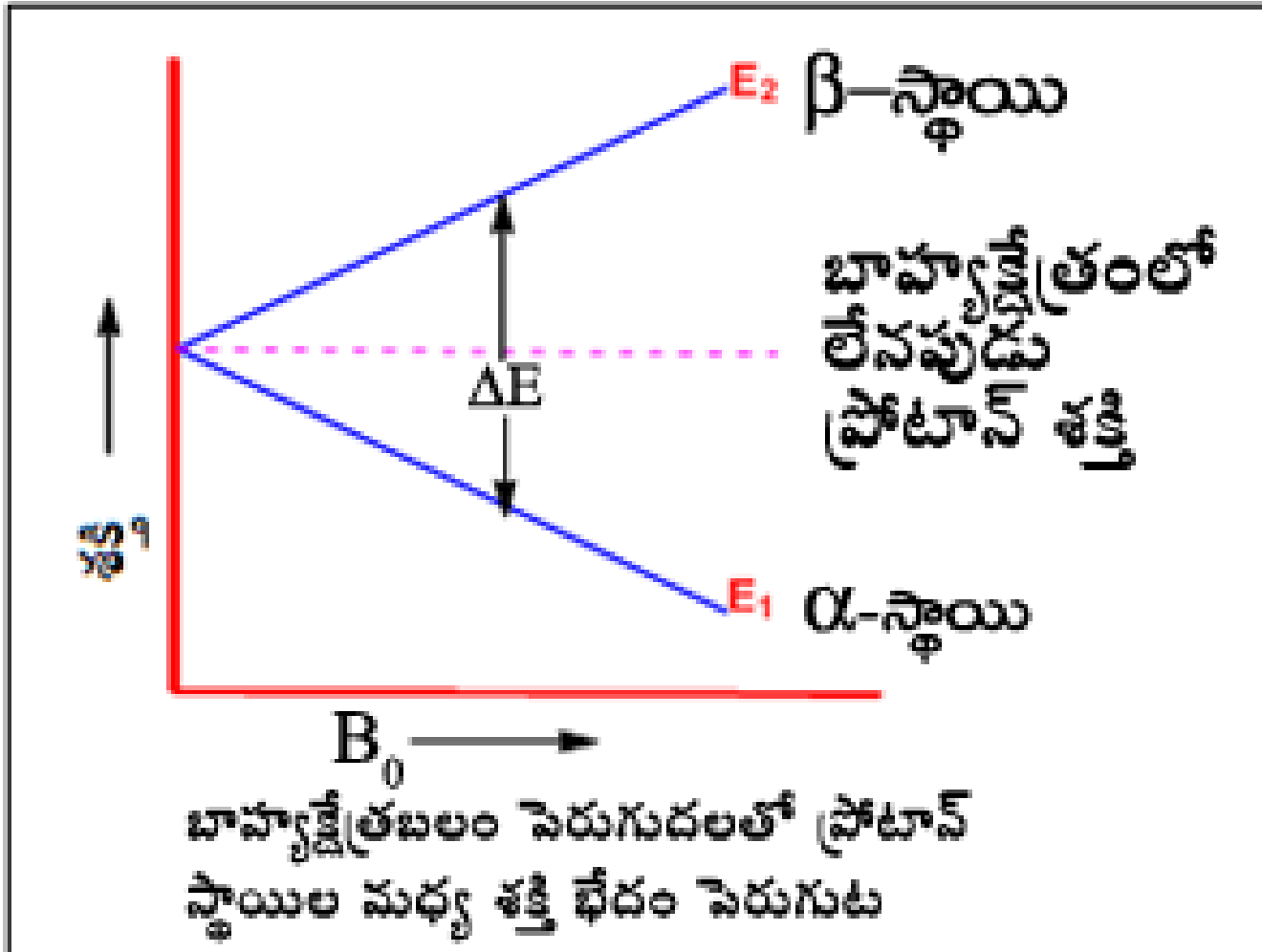
$$E_2 = +\frac{1}{2} \times \frac{\gamma h}{2\pi} \times B_0$$

- ప్రతి కేంద్రకానికి విలువ γ ఒక స్థిర రాశి.

కేంద్రకం	γ విలువ ($s^{-1}\text{gauss}^{-1}$) లో	కేంద్రకం	γ విలువ ($s^{-1}\text{gauss}^{-1}$) లో
^1H	26,753	^{19}F	25,181
^{13}C	6,728	^{31}P	10,841

- ప్రోటాన్ అయస్కాంత శక్తి స్థాయిల మధ్య శక్తి భేదం బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్ర బలంకు అనులోమానుపాతంలో ఉండునని తెలుస్తుంది.

బాహ్య క్షేత్రంలో ప్రోటాన్ శక్తి స్థాయిలు



సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

రేడియో వికిరణంతో ప్రోటానుల అనునాదం

- రేడియో కిరణ శక్తి ఈ రెండు స్థాయిల మధ్య శక్తి భేదంకి సమానం అయినపుడు రేడియో వికిరణం ప్రోటానులతో అనునాదం చెంది వికిరణ శోషణ జరుగును

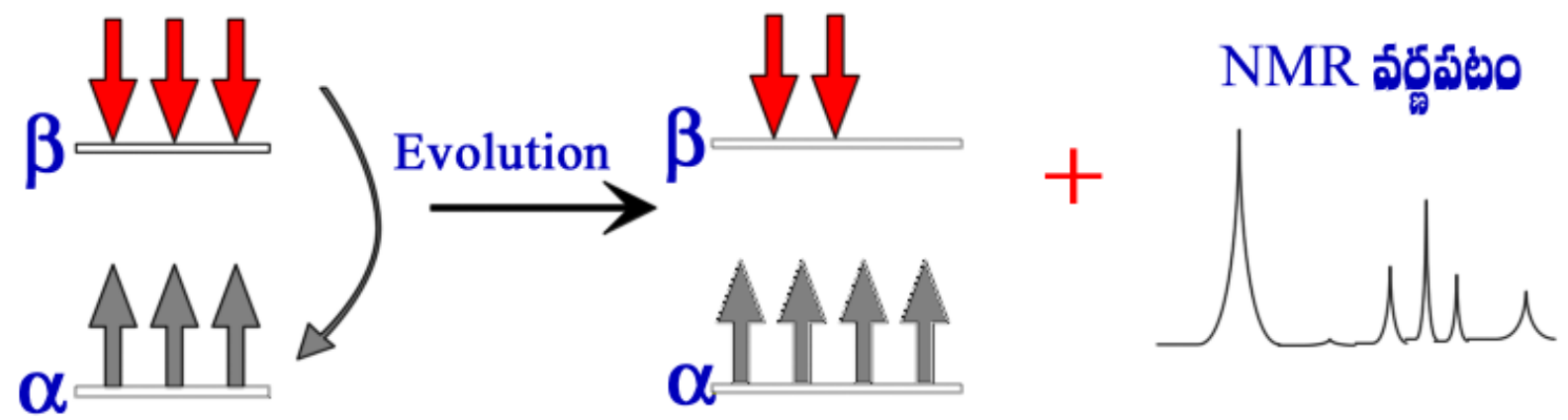
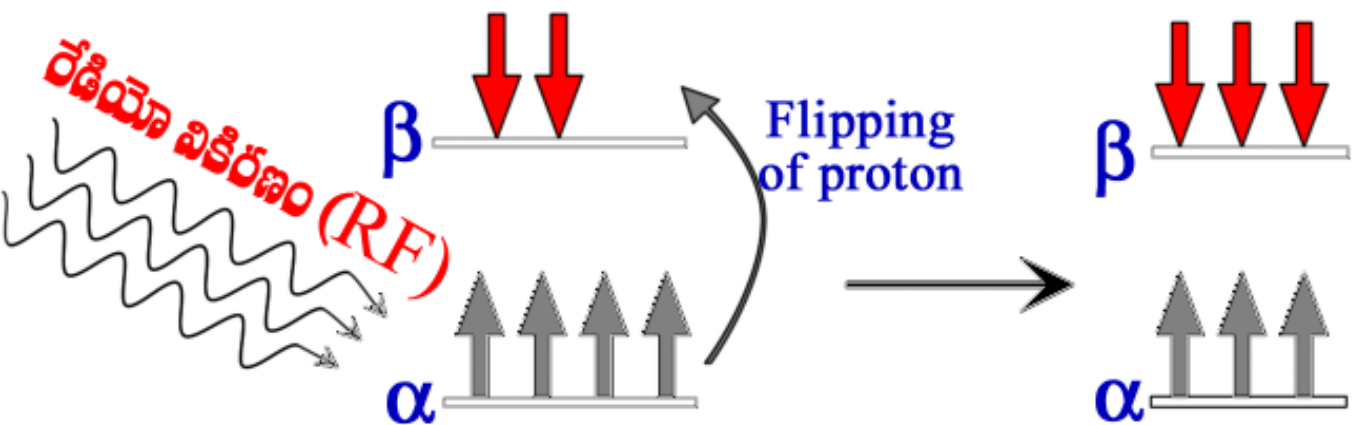
$$h\nu = \frac{\gamma h}{2\pi} \times B_0$$

పై సమీకరణం నుండి వికిరణ పౌనః పున్యం $\nu = \frac{\gamma}{2\pi} \times B_0$

- $(\gamma / 2\pi)B_0$ విలువ లార్మర్ పౌనః పున్యంను అంటారు.
- అయస్కాంత క్షేత్ర బలం పెరిగేకొలది ప్రోటాన్ లార్మర్ పౌనః పున్యం పెరుగుతుంది.
4092 గాస్ (gauss) బలం గల బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రంలో వుండే ప్రోటాన్
60 మెగా హెర్జ్ (MHz = 10^6 Hz) పౌనఃపున్యంను కలిగివుంటుంది.

రేడియో వికిరణంతో ప్రోటానుల అనునాదం

- రేడియో కిరణ పౌనఃపున్యం లార్మర్ పౌనః పున్యంతో సమానం అయినపుడు అనునాదం జరిగి వికిరణ శోషణ జరుగును.
- అపుడు ప్రోటాన్ అల్ప శక్తి స్థాయి నుండి అధిక శక్తి స్థాయికి చేరును. దీనిని ప్లిప్పింగ్ అంటారు.
- అత్యల్ప కాల వ్యవధిలో ప్రోటాన్ తిరిగి అధిక శక్తి స్థాయి నుండి అల్ప శక్తి స్థాయికి చేరును. దీనిని evolution అంటారు.
- ఈ దశలో విడుదలయ్యే శక్తిని డిటెక్టర్ NMR వర్ణపటం రూపంలో నమోదు చేయును



సిద్ధాంతం & సూత్రాలు

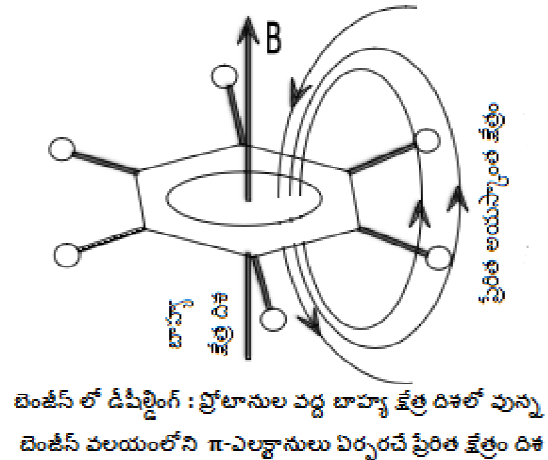
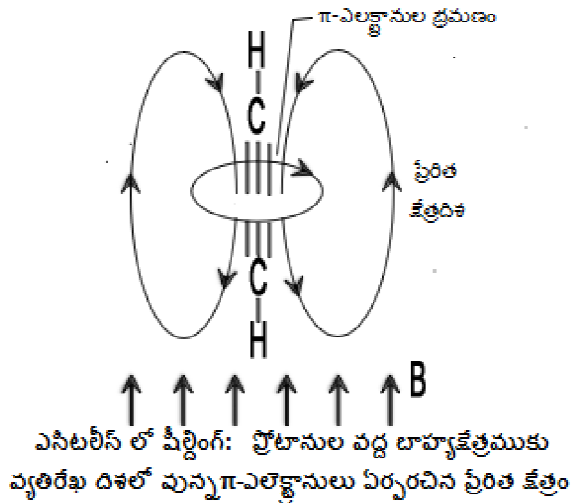
- రేడియో వికిరణ శోషణ వలన కర్బన సమ్మేళన అణువులోని వివిధ ప్రోటానులలో అయస్కాంత శక్తి స్థాయిల మధ్య జరిగే సంక్రమణలను అధ్యయనం చేయుట ద్వారా సమ్మేళనం యొక్క అణునిర్మాణంను కనుగొనుట, సరిపోల్చుట మరియు నిర్ధారించుటయే కేంద్రక అయస్కాంత అనునాద వర్ణపట శాస్త్రం యొక్క ముఖ్య సూత్రం.

షీల్డింగ్ మరియు డిషీల్డింగ్

- అణువులో కేంద్రకాలతో పాటు ఎలక్ట్రానులు కూడా వుంటాయి.
- ఈ ఎలక్ట్రానులు బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్ర ప్రభావం వలన ఒక నిర్దిష్ట దిశలో పరిభ్రమించును.
- ఈ పరిభ్రమణం వలన ఎలక్ట్రానులు ఏర్పరచు అయస్కాంతక్షేత్రాలను ప్రేరిత అయస్కాంత క్షేత్రాలు (induced magnetic fields) లేదా ద్వితీయ (secondary) అయస్కాంత క్షేత్రాలు అంటారు.
- ఎలక్ట్రానులు ఏర్పరచు ప్రేరిత అయస్కాంత క్షేత్రము యొక్క దిశ, ప్రోటానుల వద్ద బాహ్య అయస్కాంత క్షేత్రదిశలో గానీ లేదా వ్యతిరేఖ దిశలోగానీ ఉండవచ్చును.

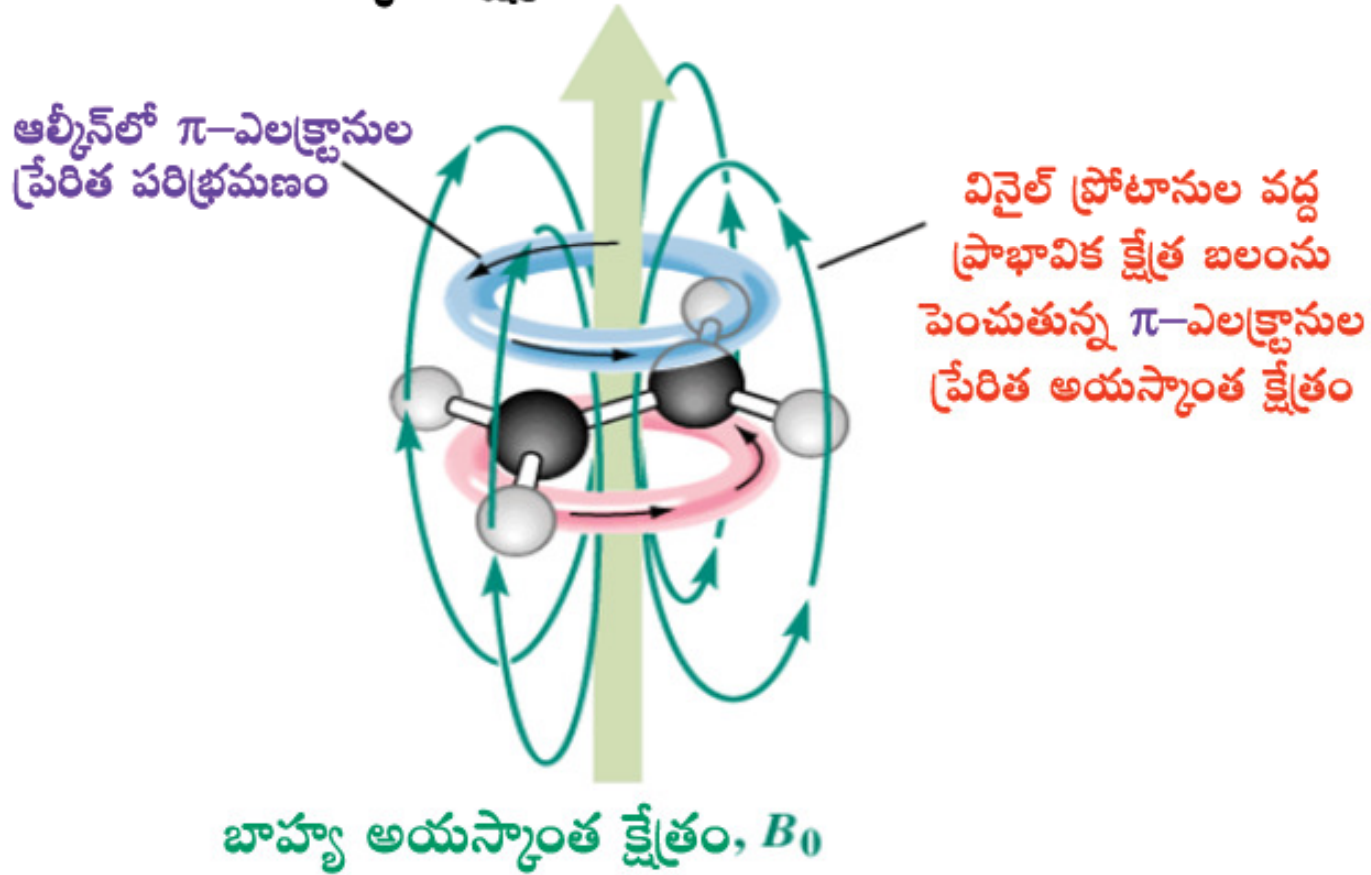
షీల్డింగ్ మరియు డిషీల్డింగ్

- వాటి దిశను బట్టి ప్రేరిత క్షేత్రాలు, ప్రోటానులు అనుభవించు క్షేత్ర బలంను తగ్గించుట గాని పెంచుట గాని చేయును.
- ద్వితీయ అయస్కాంత క్షేత్రాలు, ప్రోటాన్ అనుభవించు క్షేత్రంను తగ్గిస్తే కవచత్వం లేదా రక్షణత్వం (shielding) అని, పెంచితే అపకవచత్వం లేదా రక్షణ తొలగిపోవటం (de shielding) అని అంటారు.

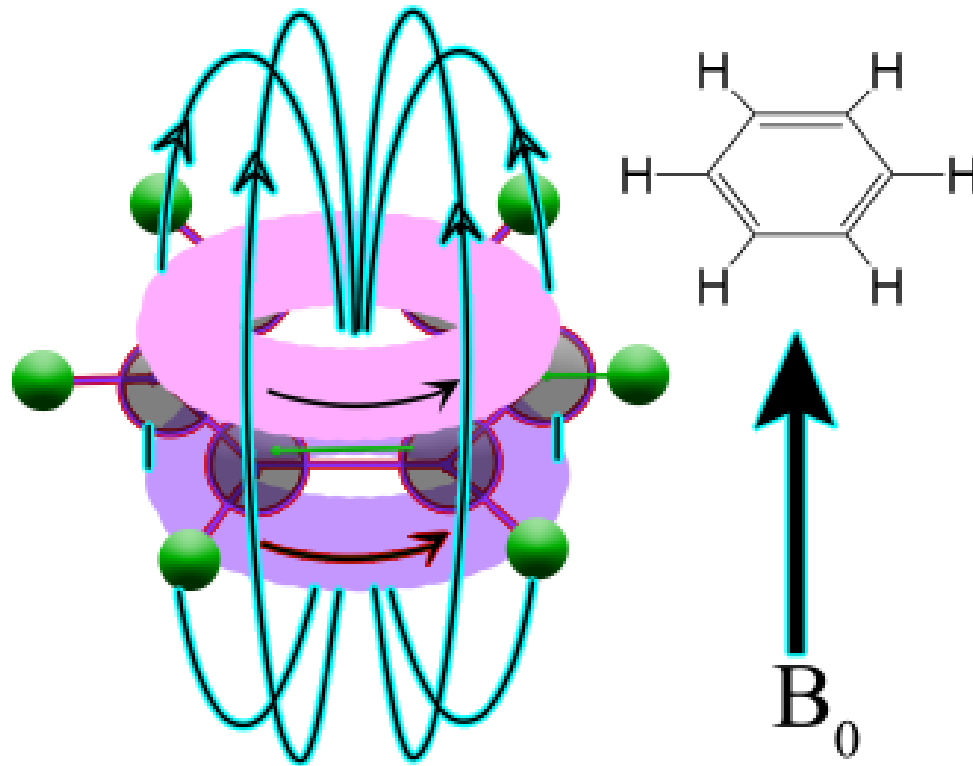


ఎథిలీన్‌లో డిప్లొయింగ్

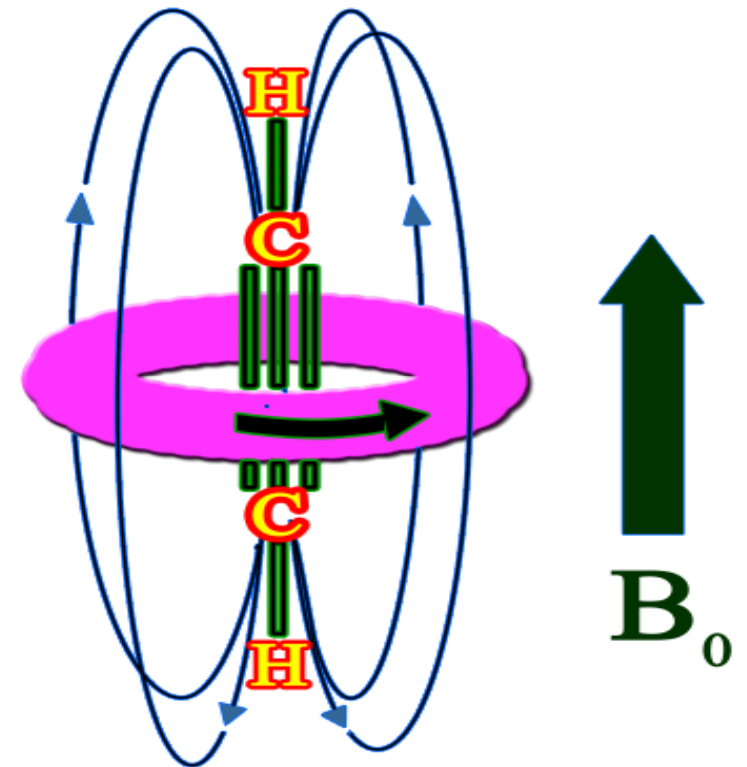
కార్బన్-కార్బన్ ద్విబంధంలోని π -బంధంలో ప్రేరితం ఆయిన ఆయస్కాంత క్షేత్రం



షీల్డింగ్ మరియు డిషీల్డింగ్



బెంజీన్‌లో డిషీల్డింగ్
(Deshielding in Benzene)

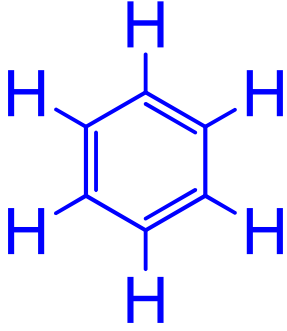


అసిటలీన్‌లో షీల్డింగ్
(Shielding in Acetylene)

సమతుల్య మరియు అసమతుల్య ప్రోటానులు

- సమాన రసాయన వాతావరణంలో గల ప్రోటానులన్నీ సమాన షీల్డింగ్ ను కలిగి వుండి ఒకే క్షేత్రబలం వద్ద వికిరణంను శోషించును.
- ఇచ్చిన రేడియో పౌనః పున్యంను ఒకే క్షేత్రబలం వద్ద శోషించే ప్రోటానులను సమతుల్య ప్రోటానులు అంటారు.
- భిన్న రసాయన వాతావరణంలో గల ప్రోటానులు భిన్నక్షేత్రబలాల వద్ద వికిరణంను శోషించును.
- ఇచ్చిన రేడియో పౌనః పున్యంను భిన్న క్షేత్రబలాల వద్ద శోషించే ప్రోటానులను అసమతుల్య ప్రోటానులు అంటారు.

$\text{CH}_3 - \text{CH}_3$
Ethane

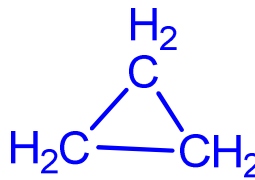
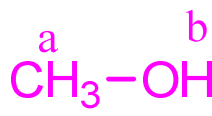
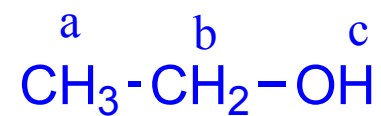
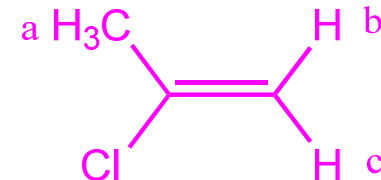
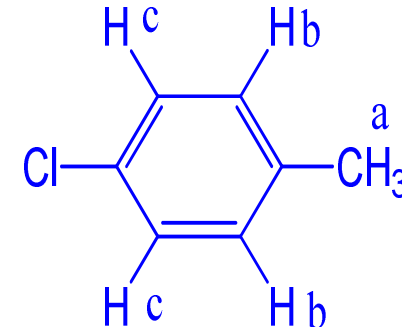


దీనిలోని 6 ప్రోటానులు ఒకే రసాయన వాతావరణంలో
వున్నాయి. కనుక ఇవి అన్నీ సమతుల్య ప్రోటానులు

బెంజీన్ లోని 6 ప్రోటానులు సమతుల్య ప్రోటానులే

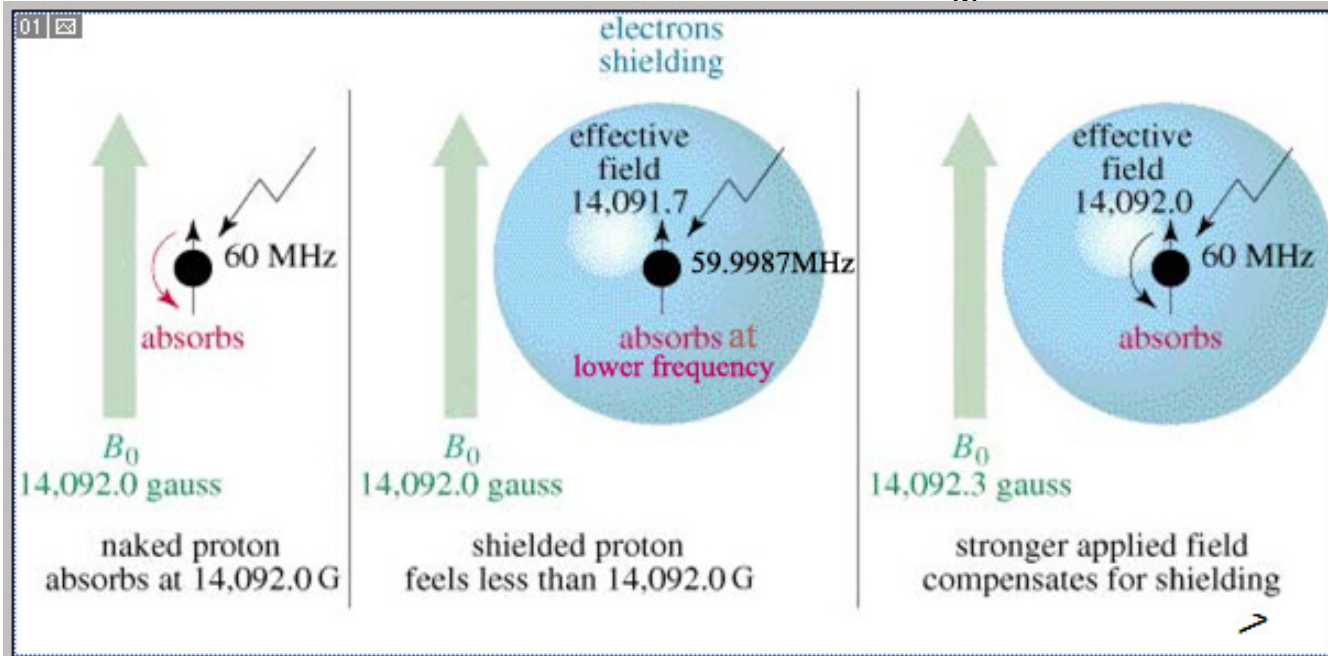
$\text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_3$
Propane

దీనిలో రెండు మిథైల్ సమూహాలు, ఒక మిథిలీన్ సమూహం
గలదు. రెండు మిథైల్ సమూహాలలోని 6 ప్రోటానులు ఒక
వాతావరణంలో వుండగా, మిథిలీన్ సమూహంలోని 2
ప్రోటానులు వాటికి భిన్న వాతావరణంలో గలవు

S.No.	సమ్మేళనం	నిర్మాణం	సమతుల్య ప్రోటాన్ వర్గాల సంఖ్య	NMR వర్ణపటంలో సంకేతాల సంఖ్య
1	సైక్లో ప్రొపేన్		1	1
2	మిథనోల్		2	2
3	ఇథనోల్		3	3
4	2-క్లోరో ప్రొపీన్		3	3
5	4-క్లోరోటోలీన్		3	3

రసాయన విస్తాపనం

- అణువులో ఎలక్ట్రానులతో పరివేష్టితమైన ప్రోటాన్ శోషించే పౌనః పున్యం, సమీపంలో ఎలక్ట్రాన్ లేని వియుక్త ప్రోటాన్ శోషించే పౌనః పున్యానికి భిన్నంగా వుండును.
- ఈ పౌనఃపున్యాల మధ్య భేదం ప్రోటాన్ చుట్టూ గల రసాయన వాతావరణంను తెలుపును. అందువలన ఈ భేదంను రసాయన విస్తాపనం అంటారు.



రసాయన విస్థాపనం

- వియుక్త ప్రోటాన్లు లభించవు కనుక రసాయన విస్థాపన విలువలను నిర్ణయించుటకు సాధారణంగా టెట్రామిథైల్ సిలేన్ [TMS, Si(CH₃)₄] ను ప్రామాణికంగా తీసుకుంటారు.
- రసాయన విస్థాపన విలువను δ -స్కేలు మరియు τ స్కేలు లో తెలియజేస్తారు.
- δ -స్కేలులో TMS యొక్క రసాయన విస్థాపన విలువను $\delta=0$ గా తీసుకుంటారు.

రసాయన విస్తాపనం: δ -స్కేలు

- రసాయన విస్తాపనం విలువను δ -స్కేలు లో ppm రూపంలో తెలియజేస్తారు.

$$\delta = \frac{\nu_{Sample} - \nu_{Ref}}{\text{స్పెక్ట్రో మీటర్ పౌనఃపున్యం}} \times 10^6 \text{ ppm}$$

$$= \frac{\text{ప్రమాణికం నుండి విస్తాపనం Hz లలో}}{\text{స్పెక్ట్రో మీటర్ పౌనఃపున్యం}} \times 10^6 \text{ ppm}$$

- $\frac{\gamma}{2\pi} B_0$ విలువను స్పెక్ట్రో మీటర్ పౌనఃపున్యం అంటారు.
- ν_{Sample} = పరీక్షా పదార్థం నందలి ప్రోటాన్ శోషించు పౌనః పున్యం
- ν_{Ref} = ప్రమాణ పదార్థం నందలి ప్రోటాన్ శోషించు పౌనః పున్యం

రసాయన విస్థాపనం: δ -స్కేలు

- కొన్ని NMR వర్ణపట మాపకాలలో రేడియో పౌనఃపున్యంను స్థిరంగా వుంచి బాహ్యక్షేత్రం బలంను పెంచుతూ వర్ణపటంను నమోదు చేస్తారు.

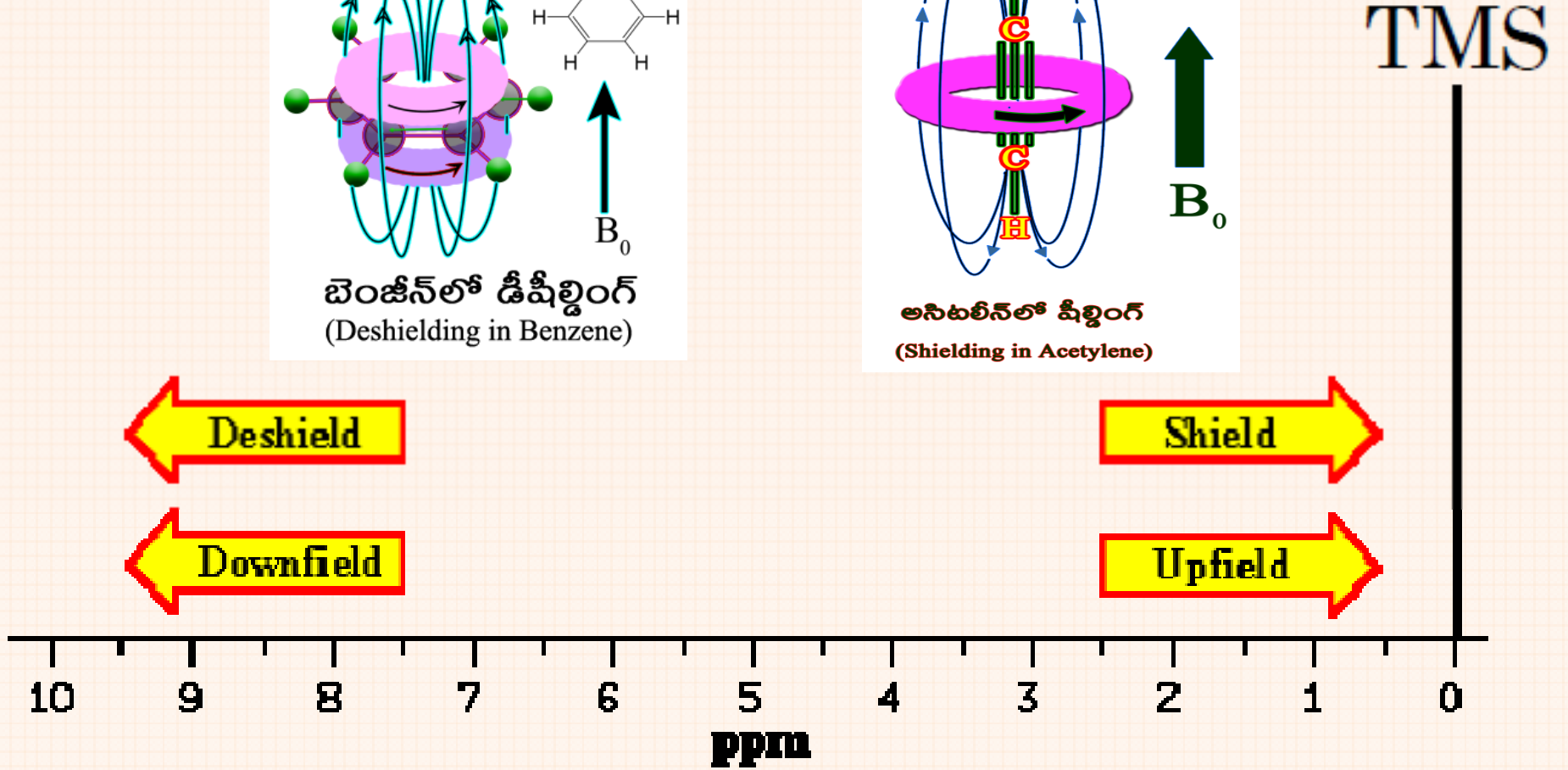
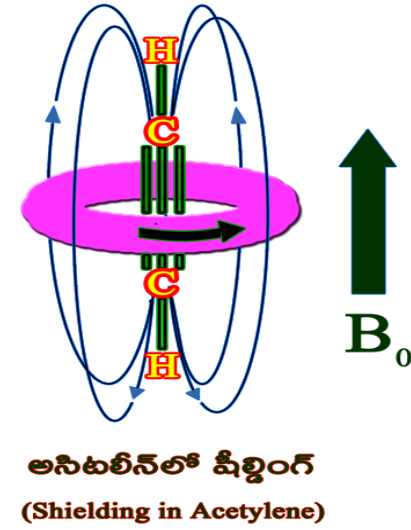
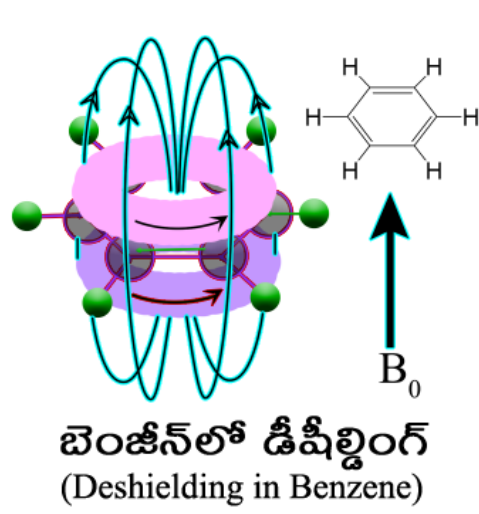
ఇలాంటి సందర్భాలలో

$$\text{రసాయన విస్థాపనం } \delta = \frac{B_R - B_S}{B_0} \times 10^6 \text{ ppm}$$

$B_R = \text{TMS}$ ప్రోటానులు అనునాదం చెందుటకు అవసరమయ్యే క్షేత్ర బలము ,

(R = reference = ప్రామాణిక పదార్థం)

$B_S =$ పరీక్షా పదార్థంలోని ప్రోటాన్ అనునాదం చెందుటకు అవసరమయ్యే అయస్కాంత క్షేత్ర బలము (S = sample)



- షీల్డింగ్ లో వున్న ప్రోటాన్లు తక్కువ ర విలువ కలిగి వుంటే , డీ షీల్డింగ్ లో వున్న ప్రోటాన్లు ఎక్కువ ర విలువను కలిగివుంటాయి.

రసాయన విస్ఫాపన విలువలను ప్రభావితం చేసే అంశాలు

- (1) సమీపంలో గల పరమాణువుల ఋణ విద్యుదాత్మకత (ప్రేరేపక ప్రభావం)
- (2) కర్బన పరమాణువు సంకరీకరణం
(Anisotropic effect-విషమ దైశిక ప్రభావం)
- (3) హైడ్రోజన్ బంధం
- (4) ప్రాదేశిక అవరోధం

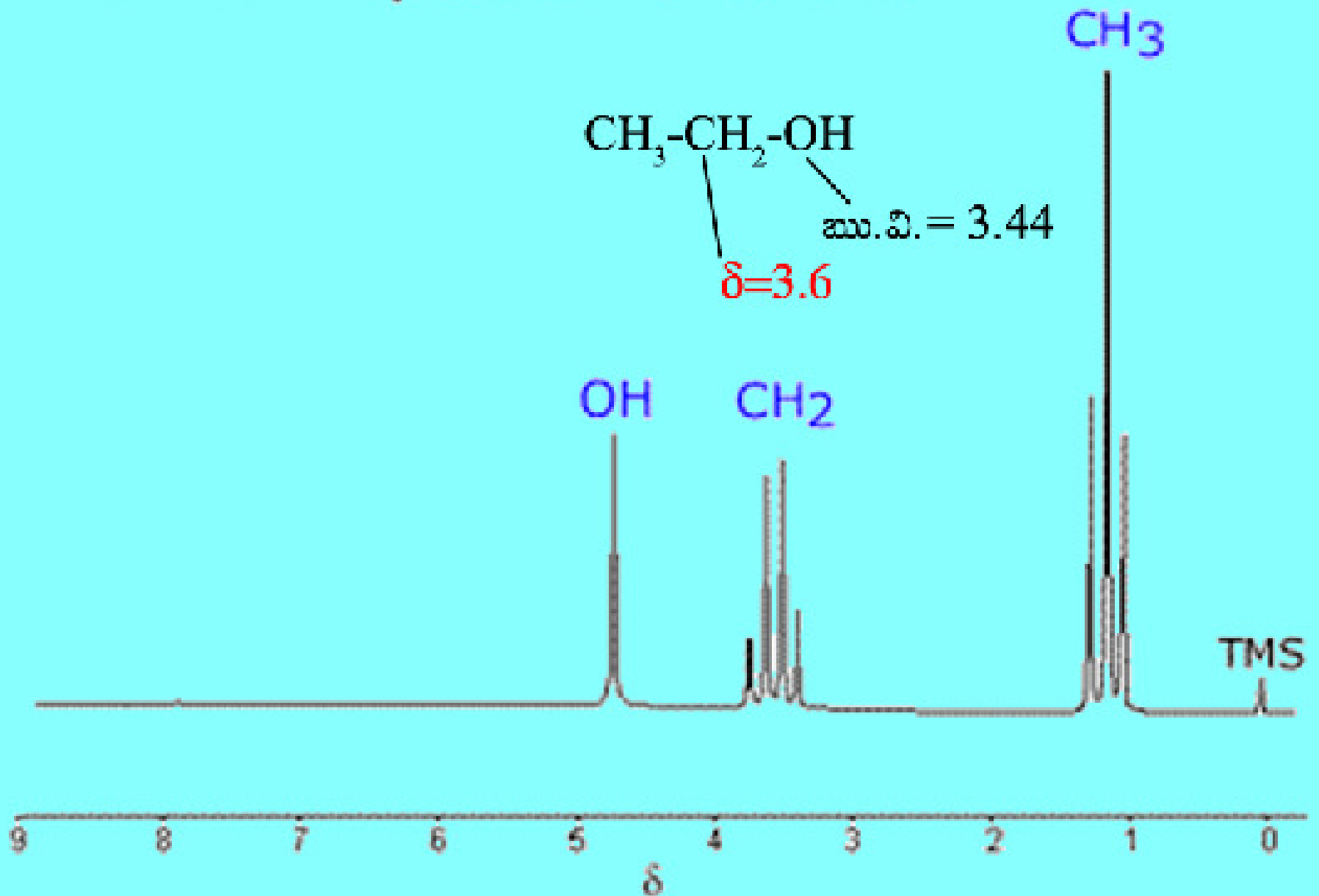
(1) రసాయన విస్తాపనం పై సమీప పరమాణువుల ఋణవిద్యుదాత్మకత ప్రభావం (ప్రేరేపక ప్రభావం)

- కార్బన్ పై ఋణవిద్యుదాత్మక (ఎలక్ట్రాన్ ఉపసంహారక) పరమాణువు(X) వుంటే, అది ప్రేరేపక ప్రభావం ద్వారా అదే కార్బన్ పై గల ప్రోటాన్ చుట్టూ గల ఎలక్ట్రాన్ సాంద్రతను తగ్గిస్తుంది. అనగా ప్రోటాన్ డిషీల్డింగ్ కు లోనవుతుంది.
- ఈ ప్రోటానుల δ విలువ X యొక్క ఋణవిద్యుదాత్మకతకు దగ్గరగా వుంటుంది.



$\text{CH}_3\text{X} \rightarrow \text{CH}_3\text{F}$	CH_3OH	CH_3Cl	CH_3Br	CH_3I	$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	
X - ఋణ విద్యుదాత్మకత	3.98	3.44	3.16	2.96	2.66	1.0
ప్రోటాన్ δ విలువ	4.26	3.47	3.05	2.68	2.16	0.0

^1H NMR Spectrum of ethanol



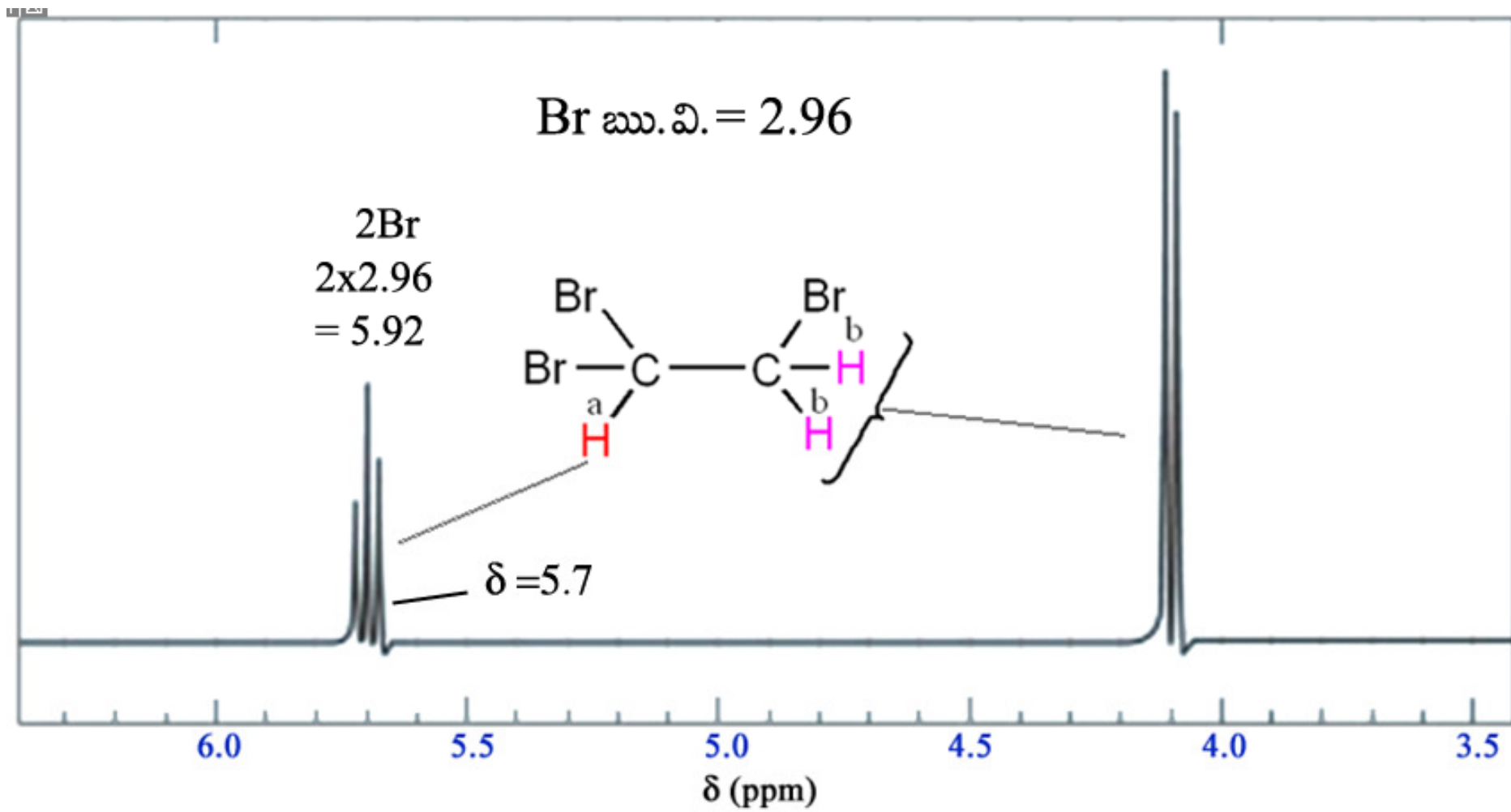
(1) రసాయన విస్థాపనం పై సమీప పరమాణువుల ఋణవిద్యుదాత్మకత ప్రభావం (ప్రేరేపక ప్రభావం)

- ఋణవిద్యుదాత్మక పరమాణువు నుండి దూరం వెళ్ళే కొలదీ దాని ప్రేరేపక ప్రభావం తగ్గుతుంది కనుక రసాయన విస్థాపనం పై దాని ప్రభావం తగ్గుతుంది

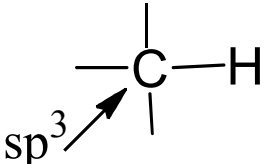
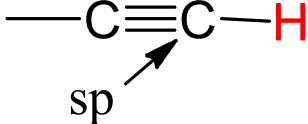
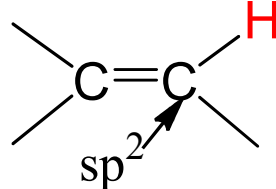
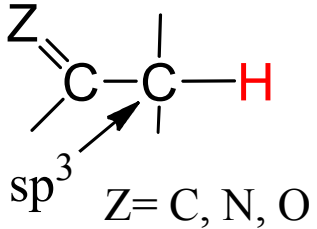
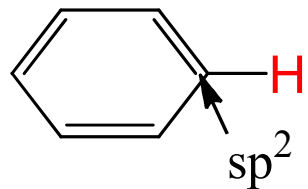
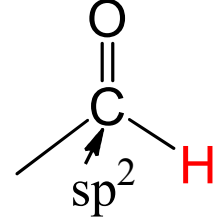
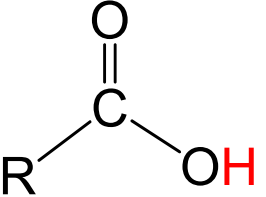
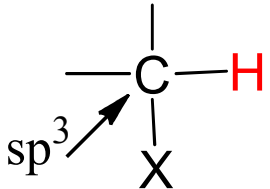
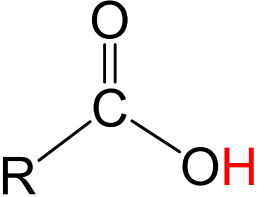
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-Cl}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-Cl}$	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-Cl}$
δ Value 3.40	1.7	0.9

- కర్బన పరమాణువుపై ఋణవిద్యుదాత్మక పరమాణువులసంఖ్య పెరిగే కొలదీ δ - విలువ పెరుగుతుంది

CH_4	CH_3Cl	CH_2Cl_2	CHCl_3
δ Value 0.23	3.05	5.30	7.27

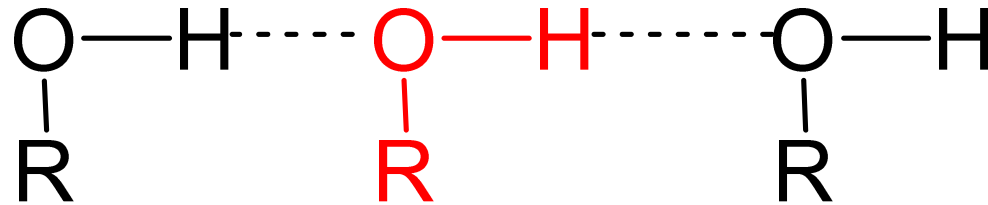


(2) రసాయన విస్తాపన విలువ – కార్బన్ సంకరీకరణం

ప్రోటాన్ రకం	రసాయన విస్తాపనం δ (ppm)	ప్రోటాన్ రకం	రసాయన విస్తాపనం δ (ppm)
	0.9 -2.0		2.5-4
<ul style="list-style-type: none"> ● R-CH₃ 0.9 ● R-CH₂-R 1.3 ● R-CH-R R R 1.7 			4.5-6.0
	1.5-2.5		6.5-8
			9-10
	2-5		10-12
X= N,O, F, Cl, Br, I		R-OH, R-NH ₂	1-5

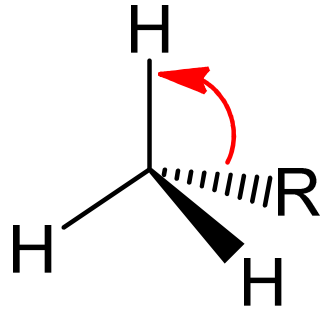
(3) రసాయన విస్తాపనంపై హైడ్రోజన్ బంధం ప్రభావం

- సాధారణంగా -OH, -NH సమూహాలు గల అణువులలో హైడ్రోజన్ బంధలుంటాయి.
- హైడ్రోజన్ బంధం వలన O-H మరియు N-H బంధ దైర్ఘ్యం పెరుగుతుంది. ఫలితంగా ప్రోటాన్ పై ఎలక్ట్రాన్ సాంద్రత తగ్గి డీషీల్డింగ్ ఏర్పడుతుంది
- ద్రావణం గాఢత పెరితే అణువుల మధ్య దూరం తగ్గి హైడ్రోజన్ బంధాల సంఖ్య పెరిగి డీషీల్డింగ్ మరింతగా జరిగి δ విలువ పెరుగును.
- ఆల్కహాల్ OH సమూహంపు ప్రోటాన్ δ విలువ స్థిరంగా ఉండక, ద్రావణి స్వభావం మరియు గాఢతను బట్టి 1-5 మధ్య వుండును

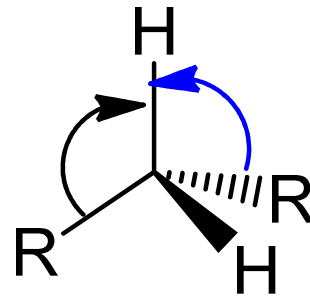


(4) ప్రాదేశిక అవరోధం

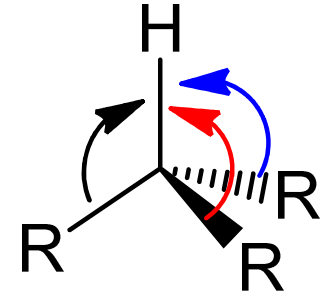
- కార్బన్ పరమాణువు చుట్టూ ప్రాదేశిక అవరోధం పెరిగేకొలది డిషిల్డింగ్ పెరిగి అనునాదం అల్ప క్షేత్ర బలం (Down field) కు మారును. అనగా రసాయన విస్థాపనం δ విలువ పెరుగును



ఒక బంధం
వలన డిషిల్డింగ్
 $\delta = 0.9$

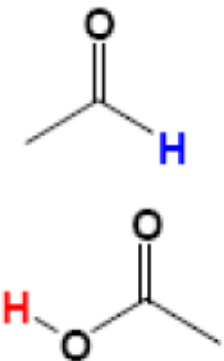

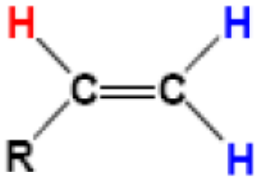
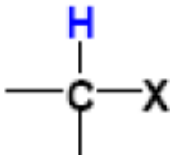
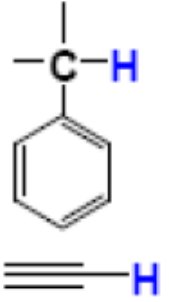
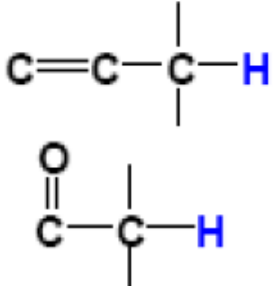
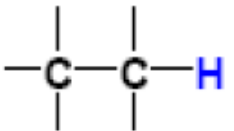


రెండు బంధాల
వలన డిషిల్డింగ్
 $\delta = 1.3$



మూడు బంధాల
వలన డిషిల్డింగ్
 $\delta = 1.7$

వివిధ ప్రోటానుల రసాయన విస్తాపన విలువలు

		 <p>vinyl</p>	 <p>X = O, N, or halogen</p>	 <p>benzylic acetylenic</p>	 <p>allylic or adjacent to carbonyl</p>	 <p>saturated</p>
13 - 9.0	8.5 - 6.5	6.5 - 4.5	5.0 - 2.5	3.0 - 2.5	2.5 - 2.0	1.5 - 0
H 13 - 10 H 10.5 - 9.5		H 6.0 - 5.0 H 5.5 - 4.5	F > Cl > Br > I O 4.0 - 3.0 N 3.0 - 2.0			3° > 2° > 1°
(ppm)						

ధన్యవాదాలు