

Résumé : RMN

-La différence ΔE , entre les deux états, est de :

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \gamma \frac{h}{2\pi} B_0$$

γ : Constant du noyau ($\text{rad} \cdot \text{T}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)

ΔE : Écart d'énergie (J)

B_0 : champ magnétique (T)

h : constante de Planck ($6,62 \cdot 10^{-34} \text{ m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$).

-La population, qui rassemble les noyaux situés dans l'état d'énergie E_2 , est un peu moins nombreuse que dans l'état E_1 légèrement plus stable

$$R = \frac{N_2}{N_1} = \exp \left[-\frac{\Delta E}{kT} \right]$$

N_1 : Nombre de noyaux situés dans l'état d'énergie E_1

N_2 : Nombre de noyaux situés dans l'état d'énergie E_2

ΔE : Écart d'énergie (J)

k : Constante de Boltzmann $1,380649 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$

T : Température ($^{\circ}\text{K}$)

-Les valeurs de déplacement chimique (δ_i) :

$$\delta_i = \frac{\nu_i - \nu_{\text{réf.}}}{\nu_{\text{appareil}}} \cdot 10^6 = \frac{\Delta \nu}{\nu_{\text{appareil}}} \cdot 10^6$$

δ_i : déplacement chimique (ppm)

$\Delta \nu$: différence de fréquence (Hz), (on a pas besoin de connaître $\nu_{\text{réf.}}$).

ν : Fréquence de l'appareil (MHz)

-Relation de **Larmor**

$$h\nu = E_2 - E_1 \Rightarrow \nu = \frac{\gamma}{2\pi} B_0 \Rightarrow \nu \cdot 2\pi = \omega = \gamma \cdot B_0$$

ν : fréquence (Hz)

ω : pulsation ($\text{rad} \cdot \text{s}^{-1}$)

γ : constante de noyau ($\text{rad} \cdot \text{T}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)

B_0 : champ magnétique (T)

Table de valeurs de déplacements chimiques en RMN ¹H.

Déplacements chimiques moyens de quelques types de protons
(δ est exprimé en ppm par rapport au TMS pris comme référence)

R est un groupe aliphatique saturé ; Ar est un groupe aromatique.

Protons CH ₃	δ	Protons CH ₂	δ	Protons CH	δ
Lié à un C AX₃ :		Lié à un C AX₃ :		Lié à un C AX₃ :	
CH ₃ -C	0,9	CH ₂ -C	1,3	CH-C	1,5
CH ₃ -C-NH ₂ (ou NR ₂)	1,15	CH ₂ -C-NH ₂ (ou NR ₂)	1,3	CH-C-OH(ou OR)	1,6-2
CH ₃ -C-Ar	1,25	CH ₂ -C-Ar	1,6	CH-C-Cl	1,6
CH ₃ -C-OH(ou OR)	1,15-1,3	CH ₂ -C-OH(ou OR)	1,8		
En α d'une insaturation:		En α d'une insaturation:		En α d'une insaturation:	
CH ₃ -C=C	1,6	CH ₂ -C=C	2,1-2,3	CH-C=C	2,5
CH ₃ -CO-OR	2,0	CH ₂ -C \equiv C	2,6	CH-C \equiv N	2,7
CH ₃ -CO-OH	2,1	CH ₂ -CO-OR	2,2	CH-CO-OH	2,6
CH ₃ -CO-NH ₂ (ou NR ₂)	2-2,1	CH ₂ -CO-OH	2,35	CH-CO-R	2,5-2,7
CH ₃ -C=C-C=O		CH ₂ -CO-NH ₂ (ou NR ₂)	2,1-2,2	CH-Ar	3,0
CH ₃ -CO-R	2,0	CH ₂ -C=C-C=O		CH-CO-Ar	3,3
CH ₃ -Ar	2,1-2,2	CH ₂ -CO-R	2,4		
CH ₃ -CO-Ar	2,3-2,4	CH ₂ -Ar	2,4		
	2,6	CH ₂ -CO-Ar	2,7		
			2,9		
Lié à un hétéroatome		Lié à un hétéroatome		Lié à un hétéroatome	
CH ₃ -NH ₂ (ou NR ₂)	2,1-2,3	CH ₂ -NH ₂ (ou NR ₂)	2,5	CH-NH ₂ (ou NR ₂)	2,9
CH ₃ -NH-COR	2,8-2,9	CH ₂ -NH-COR	3,3	CH-NH-COR	3,8-4,1
CH ₃ -OR	3,3	CH ₂ -OR	3,4	CH-OR	3,7
CH ₃ -OH	3,4	CH ₂ -OH	3,6	CH-OH	3,9
CH ₃ -OCOR	3,7	CH ₂ -OCOR	4,2	CH-OCOR	4,8-5,1
CH ₃ -OAr	3,8	CH ₂ -OAr	4,0	CH-OAr	4,0
CH ₃ -NO ₂	4,3	CH ₂ -NO ₂	4,4	CH-NO ₂	4,5-4,7
Protons liés à un C insaturé:	δ	Protons portés par un hétéroatome. Leur position dépend considérablement du solvant et de la concentration.			
-C \equiv CH	1,8-3,1	OH		NH	
-C=CH-	4,5-6,0	Alcool (ROH) : 0,7-5,5		Amine aliphatique (RNH ₂ , RNH-) : 0,6-5,0	
ArH	6,5-8,2	Phénol (ArOH) : 4,5-7,1		Amine aromatique (ArNH ₂ , ArNH-) : 2,9-4,7	
	(benzène : 7,27)	Amides (-CO-NH ₂ , CO-NH-) : 6,0-8,5			
RCH=O	9,5-10,0	Acide (R-CO-OH) : 10,5-12,5			
ArCH=O	9,7-10,5				