جامعة تكريت
كلية التربية للبنات
قسم الكيمياء

التشخيص العضوي

المحاضرة (1)

مطيافية الرنين النووي المغناطيسي للبروتون

أعـداد

أ.د. سلوى عبد الستار جبار

s.abd@tu.edu.iq

الرنين تشخيص المركبات العضوية بواسطة طيف المغناطيسي النووي

IDENTIFICATION OF THE ORGANIC COMPOUNDS BY NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE SPECTROSCOPY

طيف الرنين النووي المغناطيسي Nuclear Magnetic Resonance NMR

الرنين النووي المغناطيسي :Nuclear Magnetic Resonance

يعطي طيف **IR** لمركب ما صورة للمجاميع الفعالة المختلفة في الجزيئة ولكنه لايعطي صورة واضحة عن الهيكل الهيدروكاربوني للجزيئة أما أطياف الرنين النووي المغناطيسي فأنها تملأ هذا الفراغ بتزويدنا بصورة لذرات الهيدروجين في الجزيئة.

وتعتمد طريقة أطياف الرنين النووي المغناطيسي على امتصاص نوى معينة في الجزيئات العضوية للموجات الراديوية عندما توضع في مجال مغناطيسي شديد أي أنها تمتص الإشعاع الكهرومغناطيسي في منطقة تردد الراديو Radio Frequency .

اكتشاف ظاهرة NMR

هي ظاهرة يمكن عن طريقها للنواة أن تمتص إشعاعات كهرومغناطيسية لها تردد معين في وجود مجال مغناطيسي شديد . وكان أول من اكتشف الرنين المغناطيسي هو إزيدور اسحق رابي وهو فيزيائي أمريكي ولد في النمسا وكان هذا الاكتشاف عام ١٩٣٨. ومنذ ذلك الحين، تم استخدام الرنين المغناطيسي في الكشف عن الذرات الخفيفة (مثل الهيدروجين في الهيدروكربونات) وتم استخدامه كطريقة لدراسة الجسم البشرى وكثير من التطبيقات الأخرى

رنين : تستخدم ظاهرة الرنين لعمل معالجة ذات كفاءة عالية للأنوية باستخدام المجال المغنطيسي .

مغناطيسي : يتم التحكم في الحركات النووية عن طريق مجالات مغناطيسية

نووي : كلمة نووي تعود إلى نواة الذرة ، وهي تتكون من بروتونات ونيوترونات، وفي حالة نواة الهيدروجين، تحتوى على بروتون واحد فقط .

تعريف طيف الرنين النووي المغناطيسي: NMR Nuclear Magnetic Resonance

هو تقنية فيزيائية تعتمد على الخواص المغناطيسية الميكانيكية الكمية لنواة الذرة .وتستخدم هذه التقنية لدراسة الجزئيات العضوية من حيث البنية التركيبية والتشكيل الفراغي وبالتالي تحديد هوية المركب.

.

فكرة عمل جهاز الرنين النووي المغناطيسي

تختلف أجهزة الرنين النووي المغناطيسي عن أجهزة الطيف الأخرى إلى حد ما .فمستويات الطاقة المغناطيسية التي تحدث بينها عملية الانتقال، يعتمد وجودها على وجود مجال مغناطيسي خارجي قوي بينما في طرق التحليل الطيفي الأخرى يعتبر وجود مستويات الطاقة الخاصة بهذه التحاليل (مستويات الطاقة الالكترونية والاهتزازية والدورانيه) خاصية ذاتية قائمة في الجزيئات. والأشعة الكهرومغناطيسية المستخدمة في هذه التقنية هي اشعة الراديو والتي تكون ذات طول موجي طويل وطاقة وتردد واطئين.

وتقوم هذه التقنية على ان جميع الانوية الذرية التي تمتلك عددا فرديا من البروتونات او النيوترونات يكون لها عزم معناطيسي اصلي وعزم زاوي واكثر الانوية التي تستخدم في هذه التقنيات هي نواة ذرة الهيدروجين وهي اكثر نظائر الهيدروجين توفرا في الطبيعة وكذلك نواة ذرة الكاربون

مكونات جهاز الرنين النووي المغناطيسي

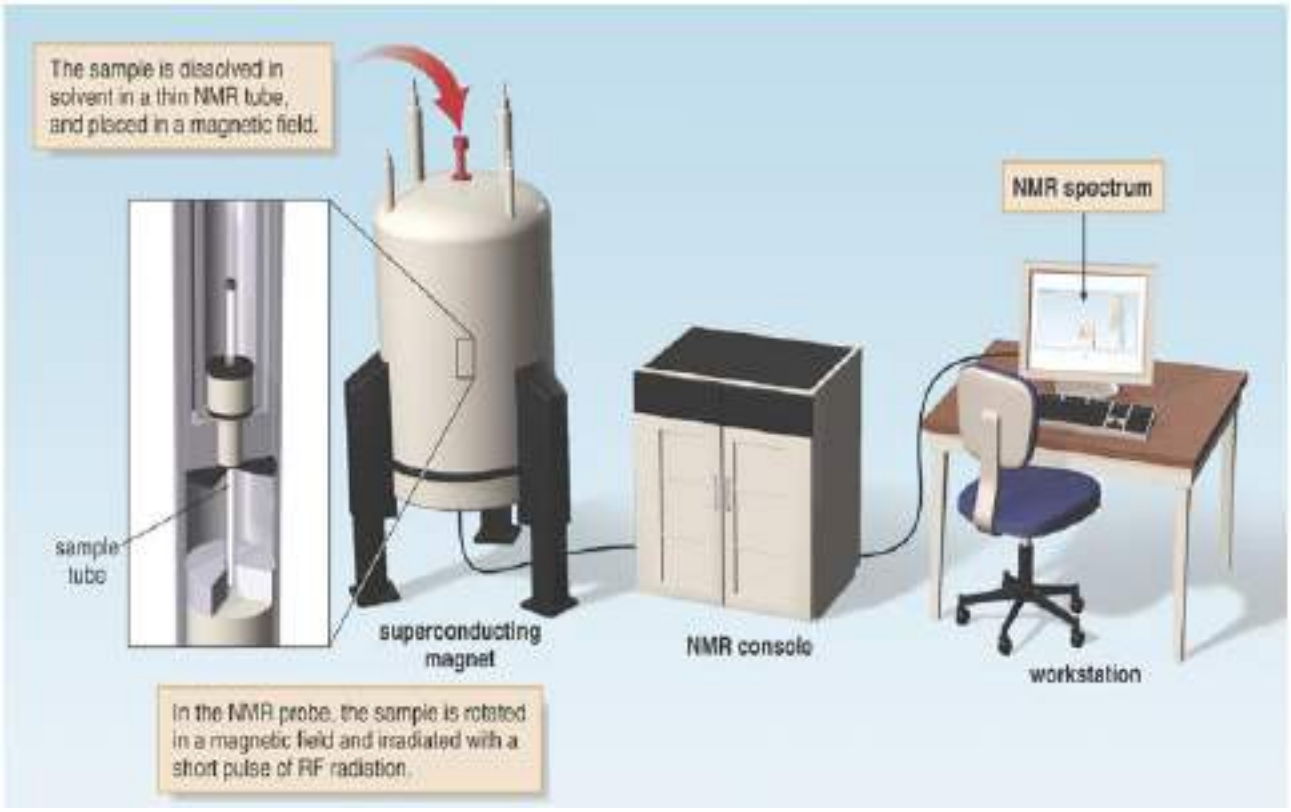
- (١)- المغناطيس Magnet
- يستخدم المغناطيس لفصل مستويات الطاقة المغناطيسية للأنوية المختلفة ، ويمكن إستخدام مغناطيس دائم permanent magnet او مغناطيس كهربى electromagnet

(٢)- وحدة تغيير شدة المجالMagnetic Field Sweep Generator

(٣) مصدر إنتاج موجات أشعة الراديو Radiofrequency Transmitter

- (٤)- وحدة وضع العينة Sample Holder and Probe
- (٥)-وحدة او مستقبل ترددات الراديو Radiofrequency Receiver or Detector الكشاف

رسم تخطيطي لمطياف الرنين النووي المغناطيسي



The source of energy in NMR is radio waves which have long wavelengths, and thus low energy and frequency.

When low-energy radio waves interact with a molecule, they can change the nuclear spins of some elements, including ^{1}H and ^{13}C

الجهاز وطريقة معالجة النموذج Apparatus and sample handling

تسجل أطياف NMR للبروتون عادة عند 100 ,60 ,90 ,80ميكا هرتز (MH_Z)

تذاب العينة (10-20 mg) في مذيب مثالي (أي لا يحتوي على ذرات H) وعادة يستعمل CCl_4أو البنزين الديتروبومي (C_6D_6) في حالة العينة قليلة القطبية أما أذا كانت العينة تذوب في المذيبات القطبية فقط فيستعمل عادة اوكسيد الديتريوم D_2O أو الأسيتون D_6أو ثنائي مثيل سلفوكسيد – $(CD_3\text{ -CS -}CD_3)D_6$ وفي حالة استعمال D_2O لايستعمل TMS كمرجع لأنه لايذوب به. ويوضع نموذج العينة المحضر في انبوبة زجاجية طولها ٢٠ سم وعرضها 0.5سم مخصصة لهذا الغرض

كذلك يجب أن يكون المذيب رخيص الثمن ويمتلك نقطة غليان واطئة وخامل .

ثم توضع هذه الأنبوبة في الفراغ الضيق الموجود بين أقطاب المغناطيس حيث تدور الأنبوبة بواسطة توربين هوائي ، تسلط أشعة راديوية وسرعان ما يتساوى التردد الراديوي للأشعة الساقطة مع التردد المغناطيسي تحصل عملية انقلاب أو الروزونانس (الرنين) أي امتصاص الطاقة من قبل العينة التي تنقل بواسطة سلك الكشاف الموجود حول الأنبوبة والذي يرسلها بدوره إلى مسجل يقوم بتسجيلها على شكل قمم هذه القمم ترسل تعود إلى المرجع $\delta=0$من اليسار إلى اليمين أي من المجال الواطئ إلى المجال العالي والقمة التي ترسم عند $\delta = 0$ تعود للمرجع $(CH_3)_4Si$ TMS

يفضل رباعي مثيل السيلكون للاستخدام كمرجع في جهاز طيف الرنين النووي المغناطيسي للاسباب التالية

- غير فعال ولا يتفاعل مع العينة

- مركب متطاير وممكن استعادة العينة منه بسهولة
- يعطي قمة امتصاص حادة ومنفردة
- يذوب في معظم المذيبات العضوية

يحصل له رنين في مجال مغناطيسي قوي جدا وكل المركبات العضوية تمتص بعيدا عنه ونستطيع تحديد الاطياف بجعل قمة TMS = ZERO

Nuclear magnetic resonance spectroscopy is a powerful analytical technique used to characterize organic molecules by identifying carbon-hydrogen frameworks within molecules.

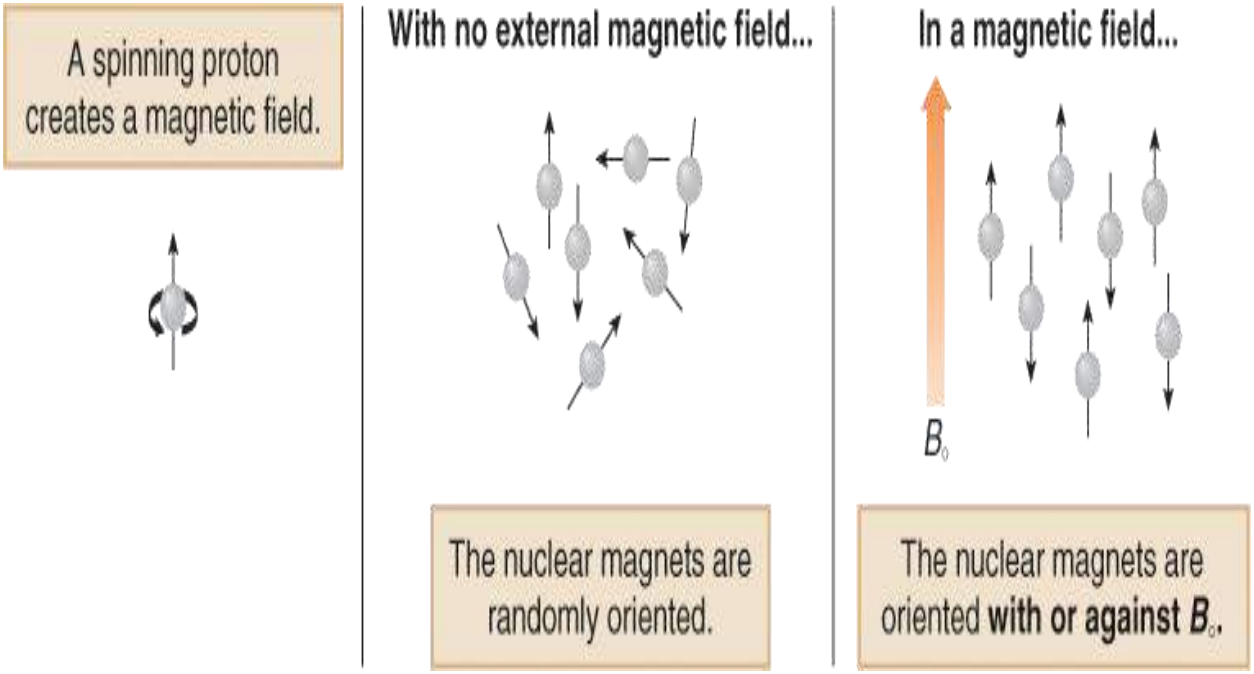
Two common types of NMR spectroscopy are used to characterize organic structure: ^{1}H NMR is used to determine the type and number of H atoms in a molecule; ^{13}C NMR is used to determine the type of carbon atoms in the molecule.

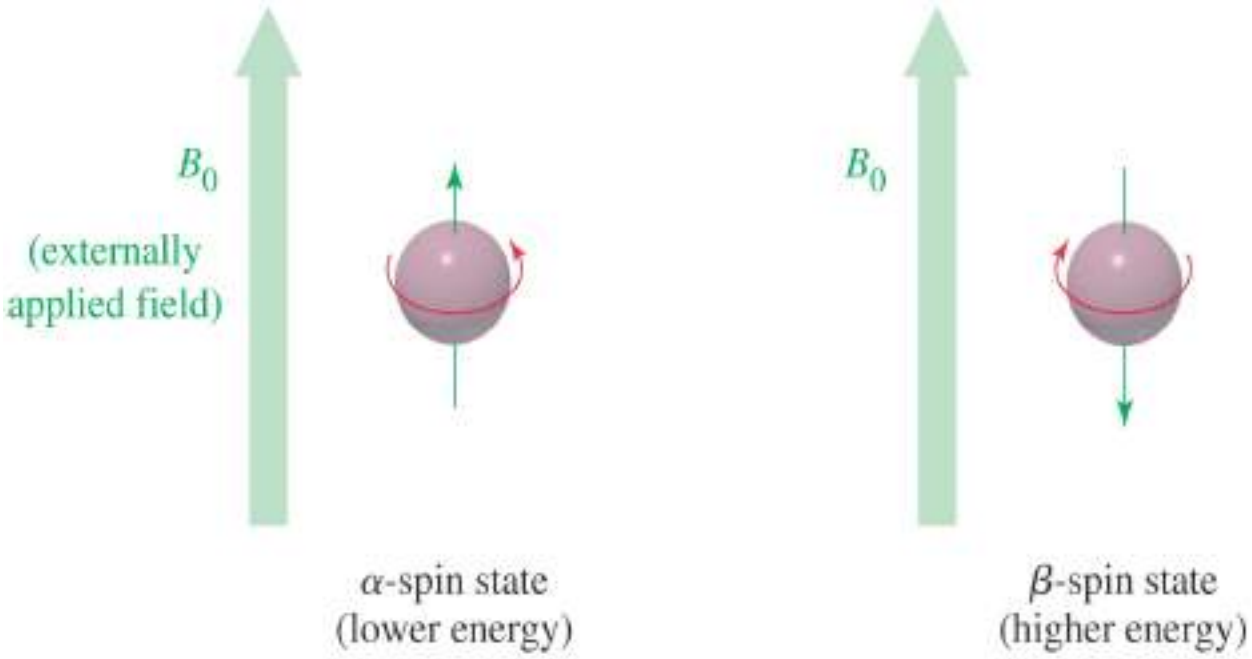
The source of energy in NMR is radio waves which have long wavelengths, and thus low energy and frequency.

When low-energy radio waves interact with a molecule, they can change the nuclear spins of some elements, including ^{1}H and ^{13}C.

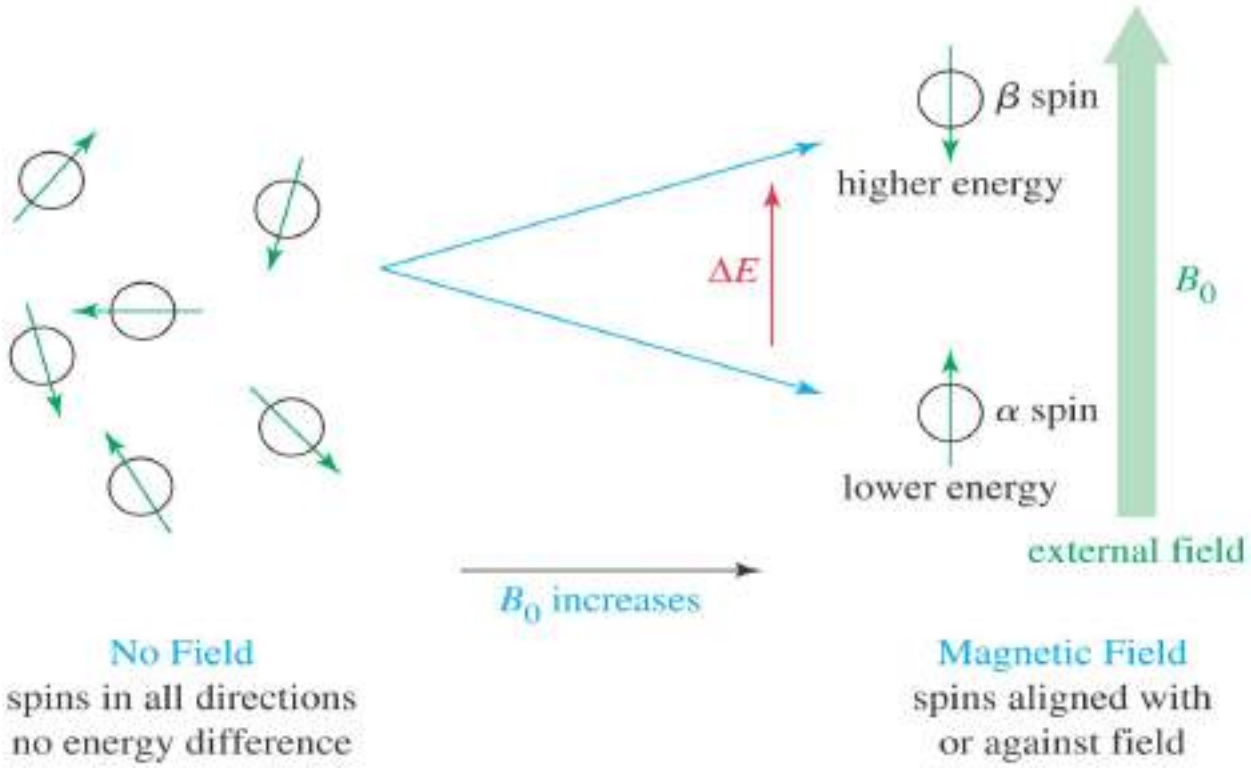
When a charged particle such as a proton spins on its axis, it creates a magnetic field. Thus, the nucleus can be considered to be a tiny bar magnet.

Normally, these tiny bar magnets are randomly oriented in space. However, in the presence of a magnetic field B0, they are oriented with or against this applied field. More nuclei are oriented with the applied field because this arrangement is lower in energy.



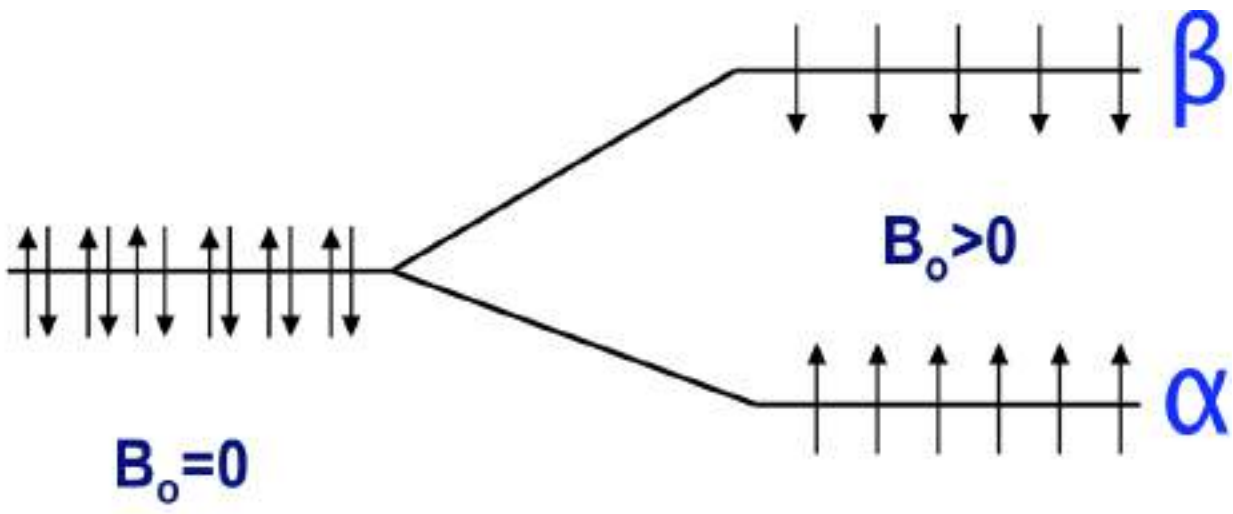


أذن هناك حالتان للدوران حسب الرسم السابق لرنين البروتون إحدى هذه الحالات تكون ذات طاقة واطئة وهذه هي التي تكون باتجاه المجال المغناطيسي الخارجي والثانية تكون أعلى طاقة وعكس المجال كما نلاحظ من الرسم التالي

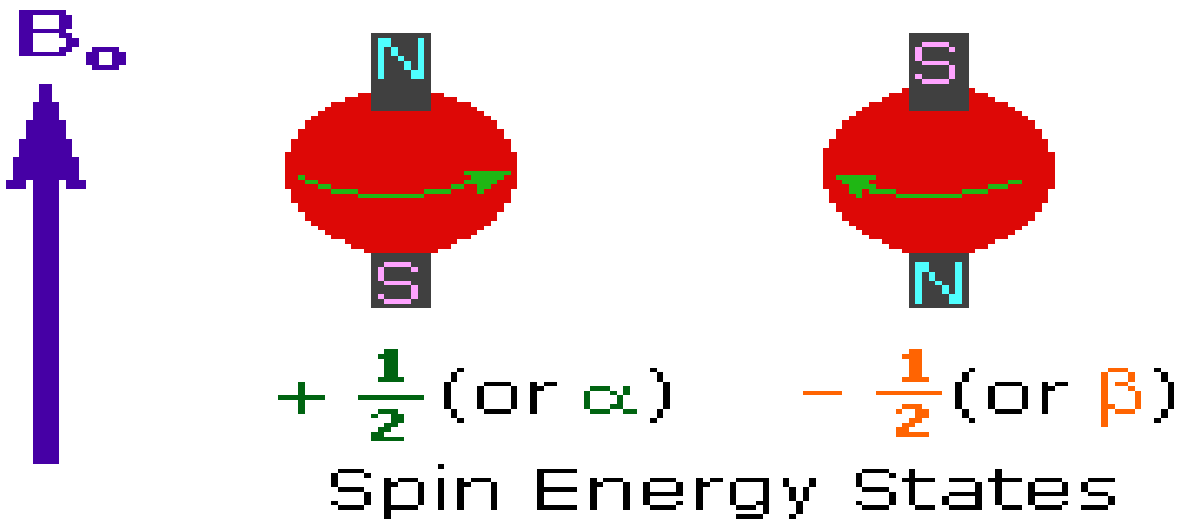


شكل يوضح البروتونات بدون مجال وبعد تسليط المجال المغناطيسي الخارجي وكمية الطاقة اللازمة

لحصول رنين



البروتون الذي يبرم يولد عزما مغناطيسيا نوويا ، فإذا وضعت جزيئات تحتوي على ذرات هيدروجين في مجال مغناطيسي خارجي (Bo) يعطي العزم المغناطيسي لكل نواة ذرة هيدروجين أو بروتون في أحد الاتجاهين الأول يكون مواز للمجال المغناطيسي الخارجي والثاني معاكس للمجال المغناطيسي الخارجي .ففي حالة التوازي يشير العزم المغناطيسي للبروتون إلى نفس اتجاه المجال المسلط أما الحالة الأخرى فأن العزم المغناطيسي يعاكس المجال الخارجي .وفي أي وقت يكون حوالي نصف البروتونات في حالة التوازي ونصفها الآخر في الحالة المعاكسة.



ويمكن زيادة الفرق فى الطاقة بين هذين المستويين بزيادة شدة المجال المغناطيسى الخارجى ولذلك توضع هذه الأنوية فى مجال مغناطيسى خارجى (بين قطبي مغناطيس كبير) ويسلط عليها أشعة الراديو Radio wave ، فتمتص هذه الأنوية طاقة أشعة الراديو وتنتقل إلى مستوى الطاقة الأعلى ، وينتج عن ذلك تغير فى إتجاه الحركة المغزلية للنواة ، ثم ترجع الأنوية من المستوى العالي في الطاقة الى المستوى المنخفض مرة أخرى وهكذا ، ويطلق على هذه الظاهرة ظاهرة الرنين النووي المغناطيسي. وإمتصاص الطاقة يمكن الكشف عنه وتكبيره كطيف خطى ويطلق عليه إشارة الرنين المغناطيسي resonance signal

Information from ^{1}H-NMR spectra:

Four different features of a 1H NMR spectrum provide

Number of signals: How many different types of hydrogens in the molecule.

Position of signals (chemical shift): What types of hydrogens.

integration: How many hydrogens of each type.

Intensity of signals.

Spin-spin splitting of signals : How many neighboring hydrogens.

Whenever two (or three) different sets of adjacent protons are equivalent to each other, use the **n + 1 rule** to determine the splitting pattern.

الإزاحة الكيميائية (δ) Chemical Shift

الإزاحة الكيميائية يرمز لها بالرمز (δ) أو (τ) والأول هو الغالب عالمياً حيث أنها تعرف بالفرق بين موقع امتصاص بروتون ما وموقع امتصاص بروتون ذلك المرجع (TMS)

TMS = trimethyl silane $(CH_3)_4Si$

الإزاحة الكيميائية δ يعبر عنها بالقانون:-

$$\delta = \frac{\text{position of signal (sample)} - \text{position of TMS peak}}{\text{Spectrometer frequency}} \times 10^6$$

هي عبارة عن الفرق بين تردد بروتونات العينة وتردد **TMS** بالهيرتز مقسوما على تردد جهاز السبكتروميتر بالميغاهرتز أي جزء بالمليون .

$1\ MHz = 1\times10^6 HZ$

وأن الإزاحة الكيميائية (**δ**) هي واحدة مهما اختلفت أجهزة الطيف .

يجب أن نضع مقياسا لـ **^{1}HNMR** ونضع قيمة **TMS** في صفر هرتز(**0Hz**) على الحافة اليمنى يزداد المجال المغناطيسي باتجاه اليمين وعندما تعطي الإزاحات الكيميائية بوحدات الهيرتز (نرمز لها بـ ***ν***)فيجب تحديد التردد المسلط ، ويمكن التعبير عن الإزاحات الكيميائية بوحدات خالية الأبعاد (**δ**) مستقلة عن التردد المسلط وذلك بقسمة (***ν***) على التردد المسلط وضربه بـ 10^6 فقمة في **Hz 60** (***ν* 60**) من(**TMS**) في تردد مسلط مقداره **MHz 60** تكون في **δ=1ppm** أو جزء بالمليون

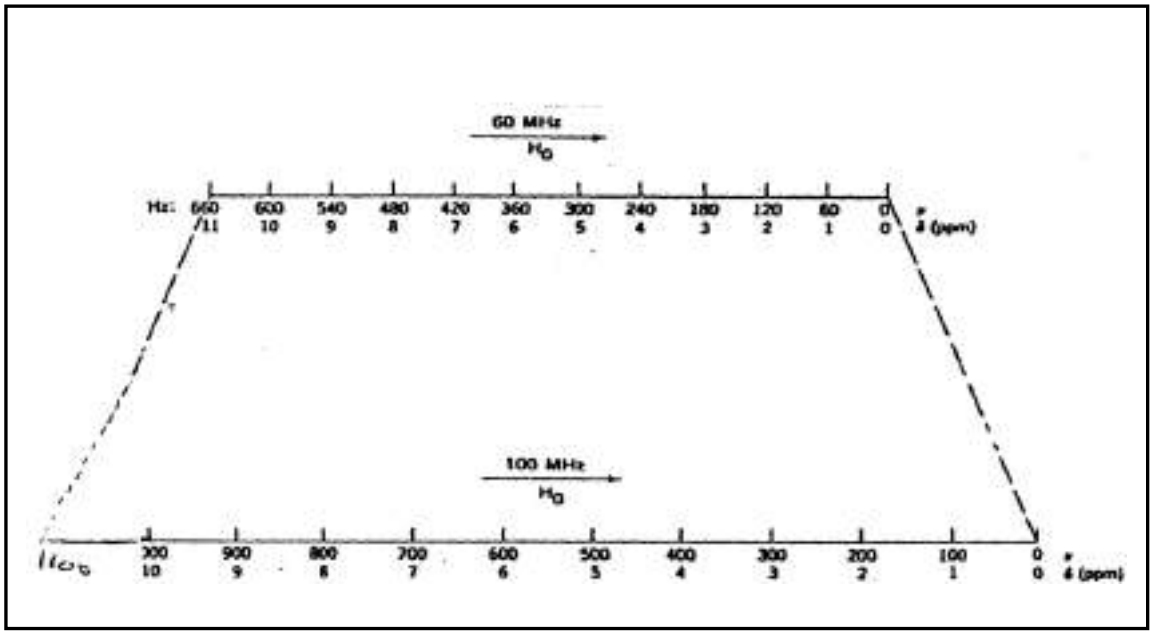
.

وهناك نظام آخر يعطي القيمة **10.00** لرباعي مثيل سيلان (**tetra methyl silane**) ويعبر عن الإزاحات الكيميائية بدلالة قيم **τ** (تاو) حيث أن :

τ=10.00 - δ

ونادرا ما تضاف إزاحات في مجال أعلى من **TMS**(**δ 0.00 , τ 10.00**).وتزداد قيم **τ** عدديا فقط بالمقابل تظهر قيم **δ** بإشارات سالبة.

عالمياً يستعمل نظام (**δ**)ونستعمله هنا أيضا.



من المهم أن نعرف أن (**δ**)التي يعبر عنها بالهيرتز (**Hz**) تتناسب مباشرة مع شدة المجال المسلط(**Bo**) ومن ثم مع التردد المسلط.وهذا مفهوم لأن الإزاحة الكيميائية تعتمد على الحجب الدايامغناطيسي الذي يحث بواسطة **Bo** . وينبغي استعمال مجال مغناطيسي أقوى والذي يتفق مع تجانس المجال وذلك لنشر الإزاحات الكيميائية وكالاتي :-

من المهم أن نعرف أن (δ)التي يعبر عنها بالهيرتز (**Hz**) تتناسب مباشرة مع شدة المجال المسلط(**Bo**) ومن ثم مع التردد المسلط.وهذا مفهوم لأن الإزاحة الكيميائية تعتمد على الحجب الدايامغناطيسي الذي يحث بواسطة **Bo** . وينبغي استعمال مجال مغناطيسي أقوى والذي يتفق مع تجانس المجال وذلك لنشر الإزاحات الكيميائية وكالاتي :-

العوامل المؤثرة على مواقع الإزاحة الكيميائية:-

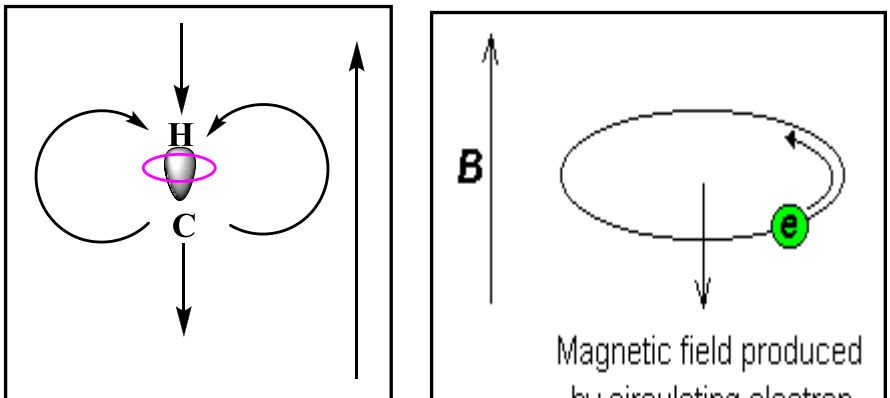
العامل الأول : الكهروسالبية .

١- السالبية الكهربائية تعتبر مرشدا للإزاحة الكيميائية ويعتمد عليها إلى حد ما الكثافة الالكترونية حول بروتونات **TMS** (السليكون موجب الكهربائية بالنسبة للكاربون)ولذلك فأن هذه البروتونات ستعاني حجباً عالياً وستتواجد قيمها في المجال العالي.

٢- وجود مجاميع ساحبة للالكترونات بفعل الحث الساحب (على طول ثلاث ذرات) حيث تعمل هذه المجاميع الساحبة على تقليل الكثافة الالكترونية حول البروتون وتقليل الحجب الدايامغناطيسي المتولد من دوران هذه الالكترونات وهذه المجالات على نوعين:-

a- المجالات المستحثة بالكترونات سيكما (σ).

ترتبط كل ذرة هيدروجين في المركب العضوي إلى كاربون ، أوكسجين أو أية ذرة أخرى بآصرة سكما فالمجال الخارجي المسلط يسبب دوران الكترونات سيكما هذه والنتيجة هي مجال مغناطيسي جزئي صغير يعاكس(**Bo**).



الكترونات ⟶ **الدائرة** σ

المجال ⟶ **المستحث يعاكس**

Bo

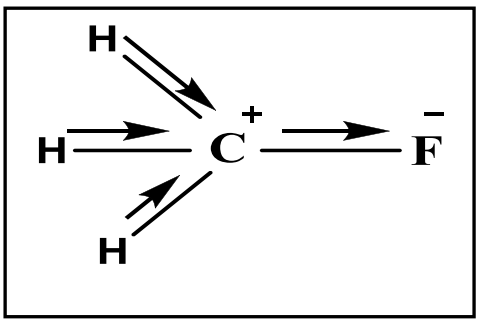
Bo

ولأن المجال المستحث يعاكس المجال الخارجي فأن البروتون المرتبط بآصرة سيكما يكون محجوب (**shielded**) ويحتاج إلى مجال مغناطيسي أعلى للتغلب على تأثير المجال المستحث لجلب البروتون لحالة الرنين .

ولذلك فالبروتون يمتص في مجال مغناطيسي عالي بالمقارنة ببروتون أعزل وتعتمد شدة المجال المستحث على الكثافة الالكترونية كلما كانت أعلى كان المجال المستحث أكبر وإزاحة الامتصاص الملحوظ إلى المجال الاعلىتكون ابعد .

تتأثر الكثافة الالكترونية لآصرة كاربون – هيدروجين التساهمية بالسالبية الكهربائية للذرات الأخرى المرتبطة بالكاربون .

مثال ذلك (**CH_3F**) أن آصرة (**C-F**) قطبية تحمل ذرة (**F**) شحنة سالبة جزئية وتحمل ذرة (**C**) شحنة موجبة جزئية وبسبب هذه الشحنة الموجبة الجزئية على ذرة الكاربون



تنسحب الكترونات سيكما في أواصر (**C-H**) باتجاه الكاربون وبعيدة عن ذرة الهيدروجين ، وهذه الإزاحة في الكثافة الالكترونية بأتجاه (**F**) عنصر سالب الكهربائية خير مثال على التأثير الحاث ، وبسبب سحب الفلور للإلكترونات وزيادة كثافتها على ذرة (**F**) وبالمقابل نقصان الكثافة الالكترونية حول كل ذرات (**H**)، نقول أن البروتونات في (**CH_3F**) غير محجوبة وتمتص في المجال الواطئ بالمقارنة مع بروتونات **CH_4**.

أعلى كهروسالبية $I < Br < Cl < F$ **أقل كهروسالبية**

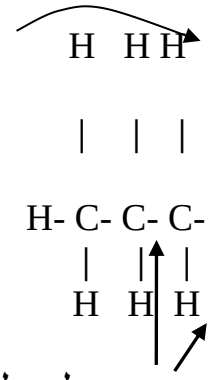
CH_3-H CH_3-I CH_3-Br CH_3-Cl CH_3-F

نقصان في حجب ذرات الهيدروجين

ففي جزيئه واحدة يكون البروتون المرتبط بذرة كاربون تحمل ذرة سالبة الكهربائية اقل حجبا من البروتونات الأخرى مثال:-

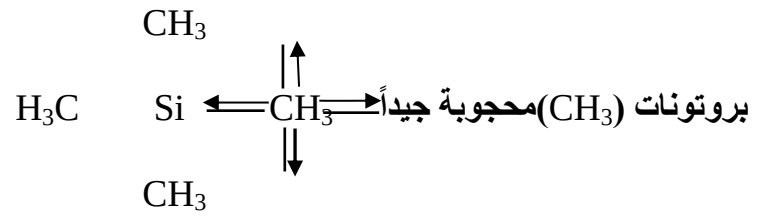
تأثير X مهم في تقليل الكثافة الالكترونية حول هذه البروتونات.

ليس لتأثير X أهمية في تقليل الكثافة الالكترونية حول البروتون



ليس لتأثير x
أهمية في تقليل
الكثافة الالكترونية حول هذا البروتون.

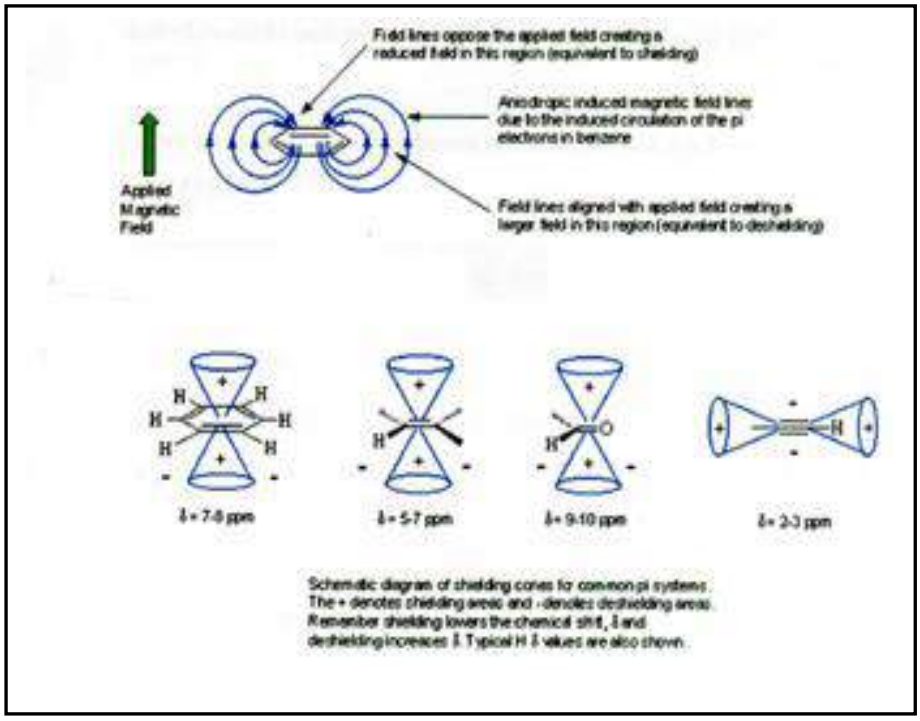
أن التأثير الحاث لذرة سالبة كهربائية يتناقص بسرعة عند مروره بعدد من أواصرسكما وفي طيف **^{1}HNMR** يهمل التأثير الحاث بعد ثلاث ذرات كاربون من الذرة السالبة الكهربائية.أما في المرجع **$(CH_3)_4Si$** فأن (**Si**) اقل سالبيه كهربائية من الكاربون وأن آصرة (**C-Si**) مستقطبة بحيث تحمل ذرة الكاربون شحنة جزئية سالبة وبالتالي فأن الكترونات الآصرة سيكما (**C-H**) تنفر وتبتعد من ذرة الكاربون السالبة وتندفع باتجاه ذرات الهيدروجين وبالتالي تكون بروتونات مجموعة (**$SiCH_3$**) محجوبة بصورة كبيرة بسبب ازدياد الكثافة الالكترونية حولها وهذا هو السبب في امتصاص بروتونات **TMS** عند المجال العالي .



بروتونات (CH_3)محجوبة جيداً

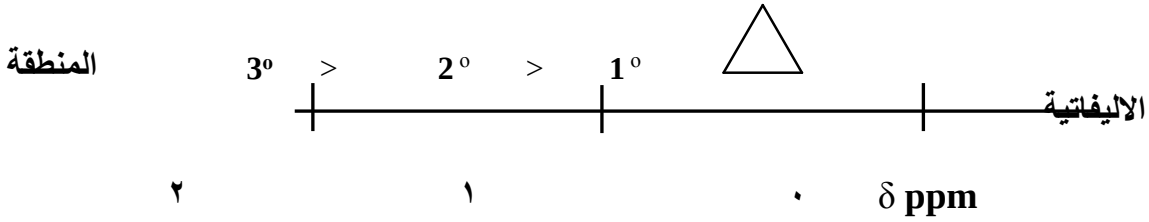
b- المجالات المستحثة بألكترونات بآي (π) .

أن المجالات المغناطيسية المستحثة بألكترونات π هي اتجاهية (أي غير متناظرة) فقياس تأثير مجموعة يتغير معتمدا على اتجاه المجموعة في المجال المغناطيسي . الكترونات π عند تعرضها إلى مجال مغناطيسي خارجي (**Bo**) فأنها تدور وتشكل تيار مغناطيسي معاكس للمجال الخارجي المسلط ويعمل على تعرية البروتونات بسبب تيار الحلقة الذي تشكله حركة دوران الكترونات π.وهذا يظهر جليا في حالة البنزين.

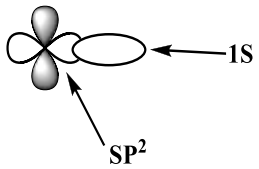


العامل الثاني التهجين Hybridization effects

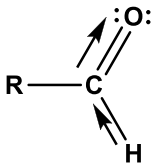
a- تهجين SP^3 أن كل ذرات الهيدروجين المتصلة بذرة كاربون من نوع SP^3 يكون لها رنين بين (**0-2ppm**)



b- تهجين SP^2



في الشكل التالي الآصرة المفردة بين ذرة الهيدروجين وبين ذرة الكاربون عبارة عن مدار **SP^2** يحتوي على نسبة اكبر من **S-** (**SP^2-S**) أي اتحاد مدار **S** مع مدار **SP^2** الذي به صفة **S** اكبر مما في تهجين **SP^3** أي انه ساحب للالكترونات بشكل اكبر وهنا يعمل على تعرية بروتون ذرة الهيدروجين من الالكترونات وتقليل عملية الحجب لذا تظهر في إزاحة كيميائية اكبر من **SP^3** وعلى هذا الأساس فأن هيدروجين الفيانيل **Vinyl** (**-C=C-C-H**) له إزاحة كيميائية اكبر من هيدروجين المركبات الاليفاتية وكذلك الهيدروجين الاروماتي له إزاحة كيميائية اكبر بحدود **ppm (7-8)** وتظهر قمة **NMR** في المجال المغناطيسي الواطئ وكذلك نفس الشيء إلى بروتون الالديهايد **(R-CHO)** حيث له إزاحة كيميائية **9-10 ppm** في المجال الواطئ أيضا وسبب ذلك السالبية الكهربائية للأوكسجين في مجموعة الكاربونيل والتي تقلل الكثافة الالكترونية حول نواة ذرة الهيدروجين .



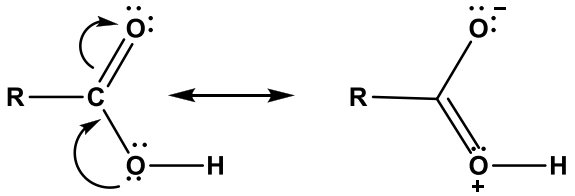
c- تهجين SP

مثال ذلك ذرة هيدروجين الاستيلين (**- C≡ C – H**) حيث تكون الآصرة بين ذرة الهيدروجين والكاربون ناشئة من اندماج مدار (**S**) ومدار(**SP**) من الكاربون ونحن نعلم بأن مدار (**SP**) به نسبة عالية من (**S**) وهو أذن يعتبر ساحب للالكترونات فنحن نتوقع أن تكون الإزاحة الكيميائية لذرة (**H**) في الاستيلين كبيرة ولكن العكس هو الصحيح حيث تظهر قمة الرنين ألبروتوني عند **2-3ppm** .

٣-الهيدروجين الحامضية ،الآصرة الهيدروجينية،البروتونات المتبادلة.

أكثر البروتونات أزاحه كيميائية هو بروتون الحامض الكاربوكسيلي حيث تكون من **10-12 ppm** وذلك لأنها أكثر تعرية أو أقل حجب من بقية البروتونات وذلك بفعل وجود مجموعة الكاربونيل الساحبة للالكترونات وكذلك وجود ذرة الأوكسجين المتصلة بذرة الهيدروجين.

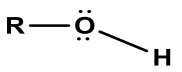
تأثير ميزوميري + حث الكتروني ساحب



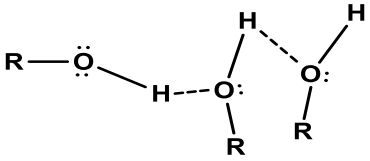
أما الآصرة الهيدروجينية والتي تحدث بين بروتونات الهيدروكسيل والأمين فأنها تعطي أزاحه متغيرة المناطق ولها مسافات عريضة كما نلاحظ من الجدول δppm

Acid	RCOOH	10.5-12.0
Phenol	ArOH	4.0 - 7.0
Alcohol	ROH	0.5 - 5.0
Amines	RNH_2	0.5 - 5.0
Amides	$RCONH_2$	5.0 – 8.0
Enols	CH=CH-OH	≥ 15

والسبب في ذلك هو أن الآصرة الهيدروجينية تقلل من الكثافة الالكترونية على ذرة الهيدروجين وذلك لارتباط الإلكترون مع ذرة أخرى مثل ذرة الأوكسجين كما نلاحظ .



dilute solution(without hydrogen bond)



conc solution(hydrogen bond)

تعتمد هذه الرابطة على التركيز ففي المحاليل المخففة تقل الرابطة ويزداد الحجب أي تقل التعرية للبروتونات من قبل الالكترونات فتكون الإزاحة (**0.5-1.0δ**) أي في المجال عالي أما المحاليل المركزة فتكون هناك رابطة هيدروجينية بشكل أوسع أي يقل الحجب وتزداد التعرية للبروتونات فتظهر في إزاحة كبيرة (**4-5ppmδ**) ، أما ذرات الهيدروجين المتبادلة مع ذرات أخرى أو مع المذيب فأنها تعطي إزاحات متغيرة الموقع

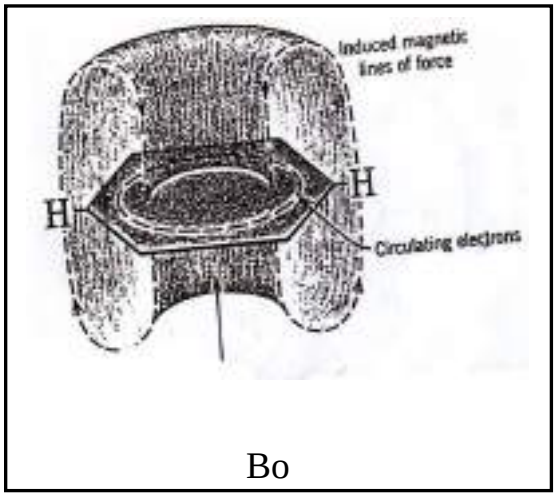
$$\mathbf{R\text{-}O\text{-}H_a + R\text{-}O\text{-}H_b \longrightarrow R\text{-}O\text{-}H_b + R\text{-}O\text{-}H_a}$$

$$\mathbf{R\text{-}O\text{-}H + H\text{:}Solv \rightleftharpoons R\text{-}\overset{\overset{H}{|}}{O^{+}}\text{-}H + \text{:}Solv^{-}}$$

عدم التجانس المغناطيسي **Magnetic Anisotropy**

تمتلك بروتونات حلقة البنزين إزاحة كيميائية كبيرة **δ** عند **(7-8ppm)** مقارنة مع بروتونات مجموعة الفنيل والالكين والالكاين والالديهايد وهذه حقيقة غير متوقعة والسبب هو وجود الكترونات **π** بالقرب من البروتونات وهذه البروتونات تحت تأثير المجال الخارجي تدور وتشكل تيار الحلقة الذي يولد مجال مغناطيسي معاكس للمجال الخارجي وان بروتونات الحلقة تكون معرضة إلى ثلاث مجالات مغناطيسية.

الأول هو الأقوى وهو المجال المغناطيسي الخارجي المسلط ،الثاني مجال مسلط من قبل دوران إلكترون التكافؤ في ذرة الهيدروجين والمجال الثالث ناشئ من عدم التجانس الحاصل في دوران الكترونات الحلقة وعدم التجانس هذا يؤدي إلى تعرية ذرات الهيدروجين وعدم حجبها بشكل كبير بالتالي تكون الإزاحة كبيرة.



نلاحظ دوران الكترونات **π**
في البنزين يحث مجال مغناطيسي
يقلل من حجب البروتونات
المجاورة (كل بروتونات البنزين الستة غير محجوبة)

لنأخذ الاستيلين **HC≡CH** كمثال ، الجزئي خطي وآصرته الثلاثية متناظرة حول المحور ، أذا اصطف المحور مع المجال المغناطيسي فأن الكترونات **π** تدور بزوايا عمودية على المجال المسلط فتحث بذلك مجالها المغناطيسي باتجاه مضاد لاتجاه المجال المسلط وبما أن البروتونات تقع على المحور المغناطيسي فأن الخطوط المغناطيسية للقوة المحثة من قبل الالكترونات الدائرة تعمل على حجب البروتونات وبذلك تجعل قمة **^{1}HNMR** في موقع من المجال أعلى مما نتوقعه من السالبية الكهربائية

رسم يوضح حجب البروتونات الاستيلينية

Bo

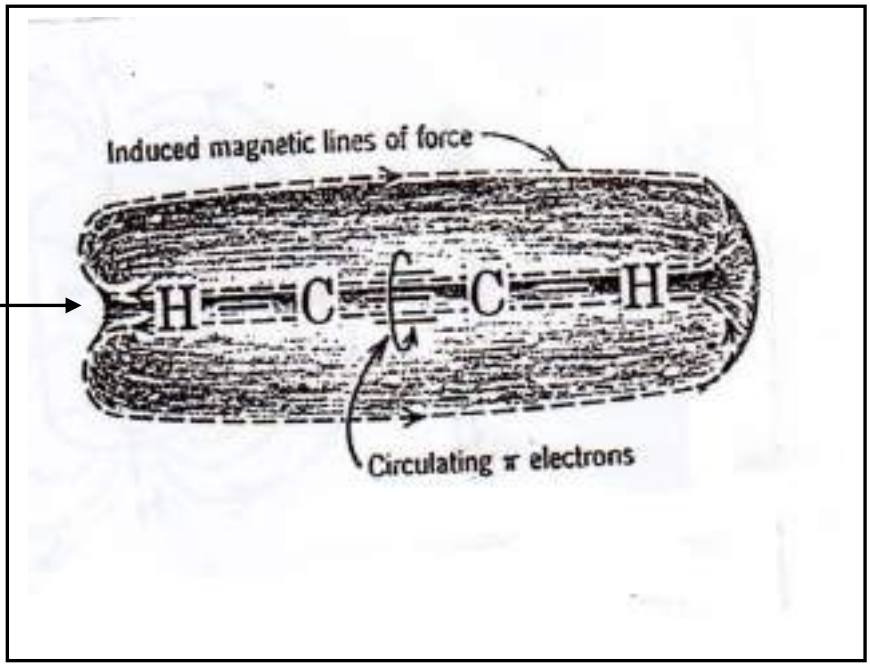


Table 2. ^{1}H NMR Chemical Shifts

H attached to	δ (ppm)
sp^3 C atom	1
C atom attached to π system	2
C atom attached to O atom	3–4
sp^2 C atom	5 6
aromatic C atom	7–8
aldehyde C atom	10
carboxylic acid O atom	11–12