

KOSSUTH LAJOS TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

Szilágyi László

MÁGNESES REZONANCIA

KÉZIRAT

Változatlan utánnomás

TANKÖNYVKIADÓ, BUDAPEST, 1977

TARTALOMJEGYZÉK

BEVEZETÉS	3
1. AZ ELEKTRO- ÉS MAGNETOSZTATIKA ALAPFOGALMAI, MÉRTÉKEGYSÉGEK	7
1.1 A SI alapegységek	8
1.2 Elektrosztatikai alapfogalmak	9
1.3 Magnetosztatikai alapfogalmak	13
2. A MÁGNESES REZONANCIA ALAPELVEI	17
2.1 Az impulzusmomentum sajátosságai	18
2.2 Az elektron és az atommag impulzusmomentuma	19
2.3 Az elektron és az atommag mágneses momentuma	20
2.4 Atomi mágneses dipólok mágneses térben	24
2.5 A Larmor-precesszió	28
2.6 Mag-kvadrupolrezonancia	29
3. A RELAXÁCIÓ	34
3.1 A mágneses energianívók betöltöttsége	35
3.2 A Bloch-egyenletek	38
3.3 A makroszkopikus mágnesezettség viselkedése a forgó koordináta-rendszerben	41
3.4 Relaxációs mechanizmusok	45
3.5 A Bloch-egyenletek megoldása, sávalakok	51
3.6 A telítés	54
4. A KÉMIAI ÁRNYÉKOLÁS	56
4.1 A g-faktor	57
4.2 Átmeneti fémionok és a g-faktor	58
4.3 A kémiai eltolódás (NMR)	66
4.4 A kémiai eltolódás elmélete	72
4.5 Proton kémiai eltolódások	74

4.5.1	Lokális diamágneses árnyékolás	75
4.5.2	Távolható árnyékolás	77
4.5.3	Gyűrűáramok	80
4.5.4	Hidrogénkötések	83
4.6	Oldószerhatások	84
4.7	Más izotópok kémiai eltolódásai	89
5.	SPIN-SPIN KÖLCSÖNHATÁSOK AZ ESR SPEKTROSKÓPIÁBAN	91
5.1	A zérus-tér felhasadás	92
5.2	A hiperfinom kölcsönhatás	96
5.3	A hiperfinom multiplettek analizise	105
5.4	A hiperfinom kölcsönhatás mechanizmusa szabad gyökökben	114
6.	SPIN-SPIN KÖLCSÖNHATÁSOK AZ NMR SPEKTROSKÓPIÁBAN	119
6.1	A magspin-magspin kölcsönhatás (spin-spin kölcsönhatás) mechanizmusa	120
6.2	A spin-spin csatolási állandó előjele	123
6.3	A spin-spin csatolási állandó függése a molekuláris paramétereiktől	131
6.3.1	Csatolás egy σ -kötésen át	131
6.3.2	Geminális csatolási állandók	132
6.3.3	Vicinális csatolási állandók	133
6.3.4	Távolható csatolási állandók	139
7.	A NAGYFELBONTÁSÚ NMR-SPEKTRUMOK ANALIZISE	143
7.1	Szimmetria és NMR-viselkedés	144
7.2	Spinrendszerek jelölése	147
7.3	Csoportcsere-folyamatok és NMR-viselkedés	149
7.4	Elsőrendű analízis	153
7.5	Az NMR-spektrumok egzakt számításának alapjai	162
7.6	Az NMR Hamilton-operátor	166
7.7	Nem-csatolt két-spin rendszer	168
7.8	Két csatolt spin	172
7.9	Intenzitások és kiválasztási szabályok	178
7.10	Az AB-spektrum	179
7.11	Az AX- és az A_2 -rendszer	182
7.12	Az ABX spinrendszer	184
7.13	Az ABX spektrum elemzése	190

8.	DINAMIKUS NMR-SPEKTROSKÓPIA	196
8.1	A sávalak analízis elméleti alapjai	196
8.1.1	Lassu csere	202
8.1.2	Gyors csere	203
8.1.3	Közepes sebességű csere	205
8.1.4	Cserefolyamatok kettőnél több cserehely esetén	207
8.1.5	Cserefolyamatok csatolt spinrendszerek részvételével	208
8.2	Protoncsere-reakciók	209
8.3	Kvadrupol-effektusok az NMR-spektrumban	224
8.4	Elektrolitoldatok NMR-vizsgálata	226
8.5	Gátolt rotáció	230
8.6	Piramidális inverziók	236
8.7	Gyűrűs rendszerek konformációjának kinetikai és egyensúlyi vizsgálata	240
	IRODALOMJEGYZÉK	248