

Magnetska rezonancija

1. Čestice u magnetnom polju
2. Eksperimentalne tehnike
3. NMR spektroskopija

Čestice u magnetskom polju

Čestice koje posjeduju spinsku kutnu količnu gibanja orijentiraju se u magnetskom polju.

Elektron e , e^-

Kvantni broj elektronskog spina s

$$s = \frac{1}{2}$$

$$|S| = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \sqrt{3/4} \hbar$$

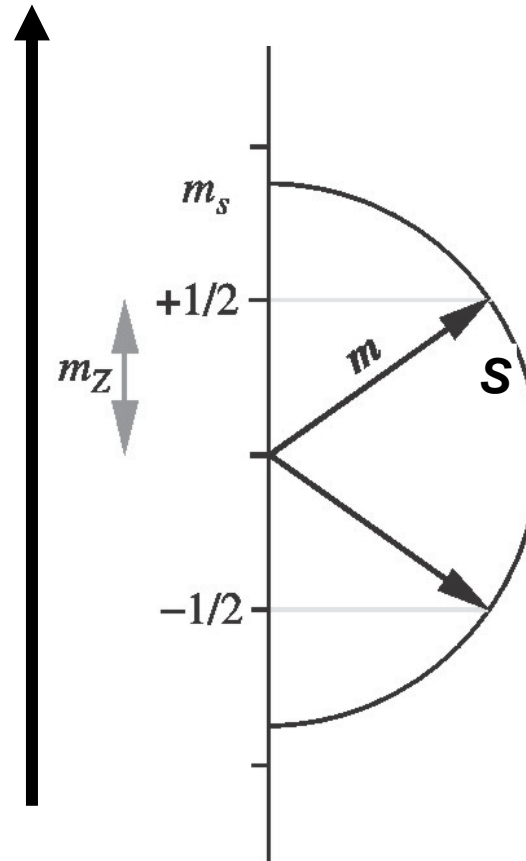
z-komponenta elektronskog spina
magnetski kvantni broj spina

$$m_s$$

$$m_s \rightarrow +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$$

$$S_z = m_s \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

B



Proton p, $^1\text{H}^+$

$$|\mathbf{I}| = \sqrt{I(I+1)} \hbar = \sqrt{3/4} \hbar$$

$$I_z = m_I \hbar = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

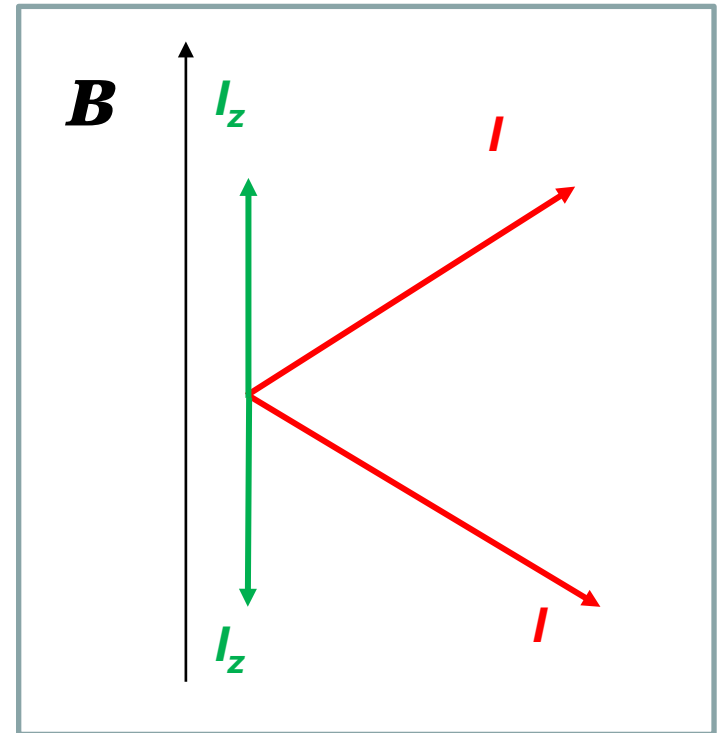
Kvantni broj nuklearnog
spina I

Z-komponenta nuklearnog spina
magnetski kvantni broj nuklearnog
spina m_I

Jezgre (općenito)

$$|\mathbf{I}| = \sqrt{I(I+1)} \hbar$$

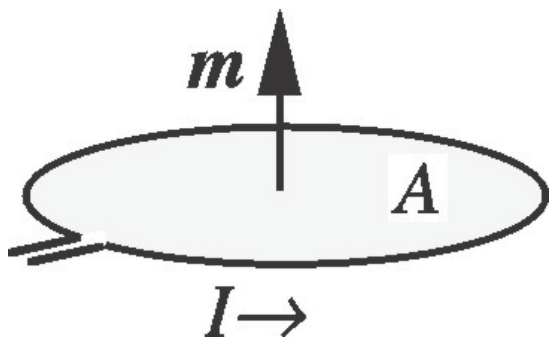
$$I_z = m_I \hbar$$



**interakcija jezgara s magnetskim
poljem:** $E = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} = -m \cdot B \cdot \cos\vartheta$

\mathbf{m} – magnetski dipolni moment

Magnetski moment strujne petlje (interakcija jezgara s magnetskim poljem)



$$m = I A$$

$$|m| = \frac{Qv}{2r\pi} r^2 \pi = \frac{Qvr}{2}$$

$$|L| = mvr$$

$$\gamma = \frac{|m|}{|L|} = \frac{Qvr}{2mrv} = \frac{|Q|}{2m} = \frac{ge}{2m} \quad (g\text{-faktor korekcije})$$

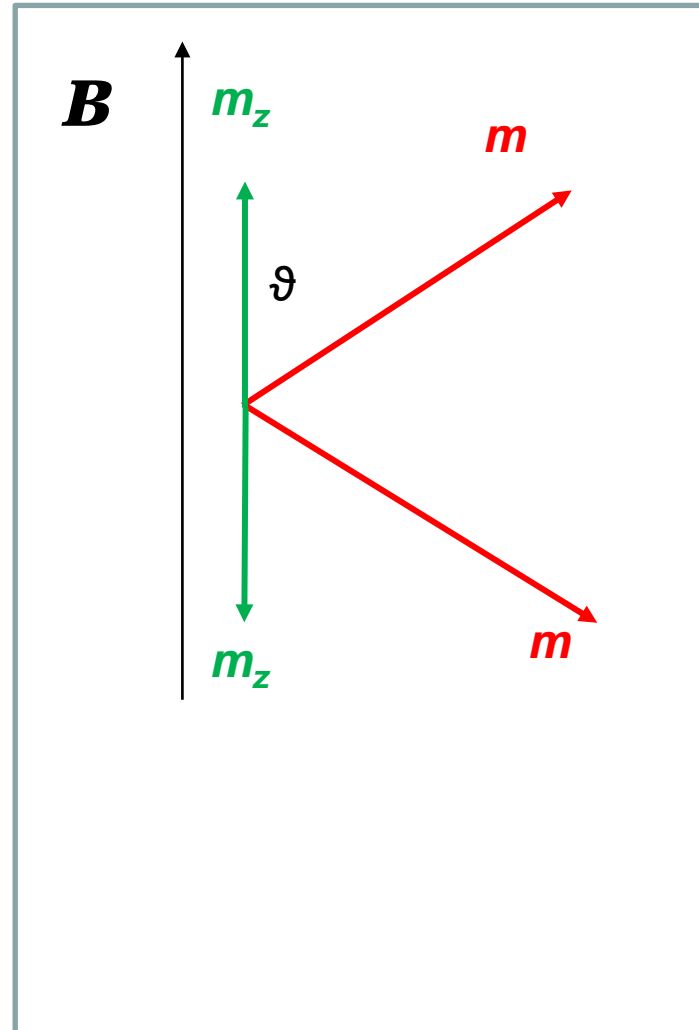
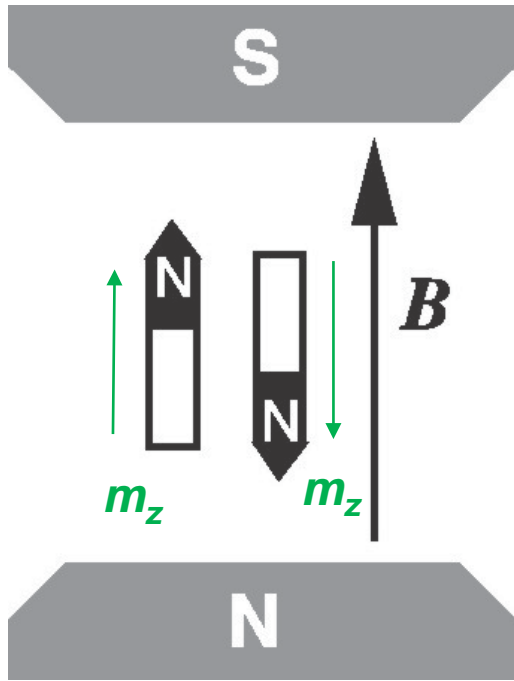
γ – magnetožirni omjer (karakterističan za svaku jezgru)

g – nuklearni g faktor

m – masa objekta naboja e

$$|m| = \frac{ge}{2m} |L| = \frac{ge}{2m} \hbar \sqrt{I(I+1)} \quad \longrightarrow \quad |m_z| = \frac{ge}{2m} |L_z| = \frac{ge}{2m} \hbar m_I$$

Dvije moguće orijentacije magnetskog momenta protona u



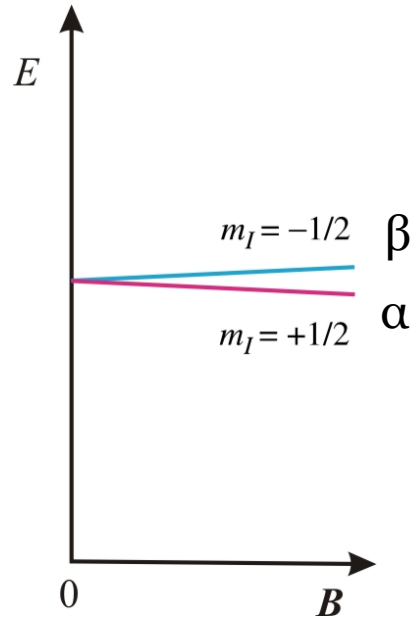
$$\begin{aligned}
 E &= -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \\
 &= -m \cdot B \cdot \cos\vartheta \\
 &= -m_z \cdot B
 \end{aligned}$$

$$|m_z| = \frac{ge}{2m} |L_z| = \frac{ge}{2m} \hbar m_I = g \frac{e\hbar}{2m} m_I = g \mu_N m_I$$

Jezgra

$$m_Z = g \mu_N m_I$$

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} \approx 5,051 \times 10^{-27} \text{ J T}^{-1}$$



Energija interakcije magnetskog momenta m s magnetskom indukcijom B (jezgra s $I = 1/2$)

$$E = -g \mu_N m_I B$$

Frekvencija rezonancije

proton ($m_I = \pm \frac{1}{2}$)

$$E = -g \mu_N m_I B$$

$$\Delta m_I = \pm 1$$

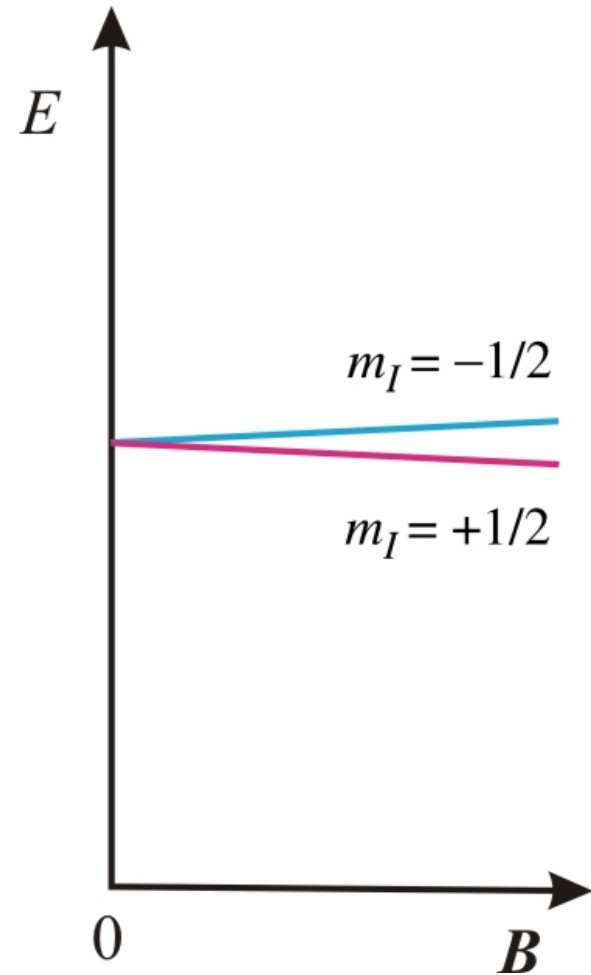
$$\nu = \frac{\Delta E}{h}$$

$$\Delta E = E(m_I - 1) - E(m_I) = h\nu$$

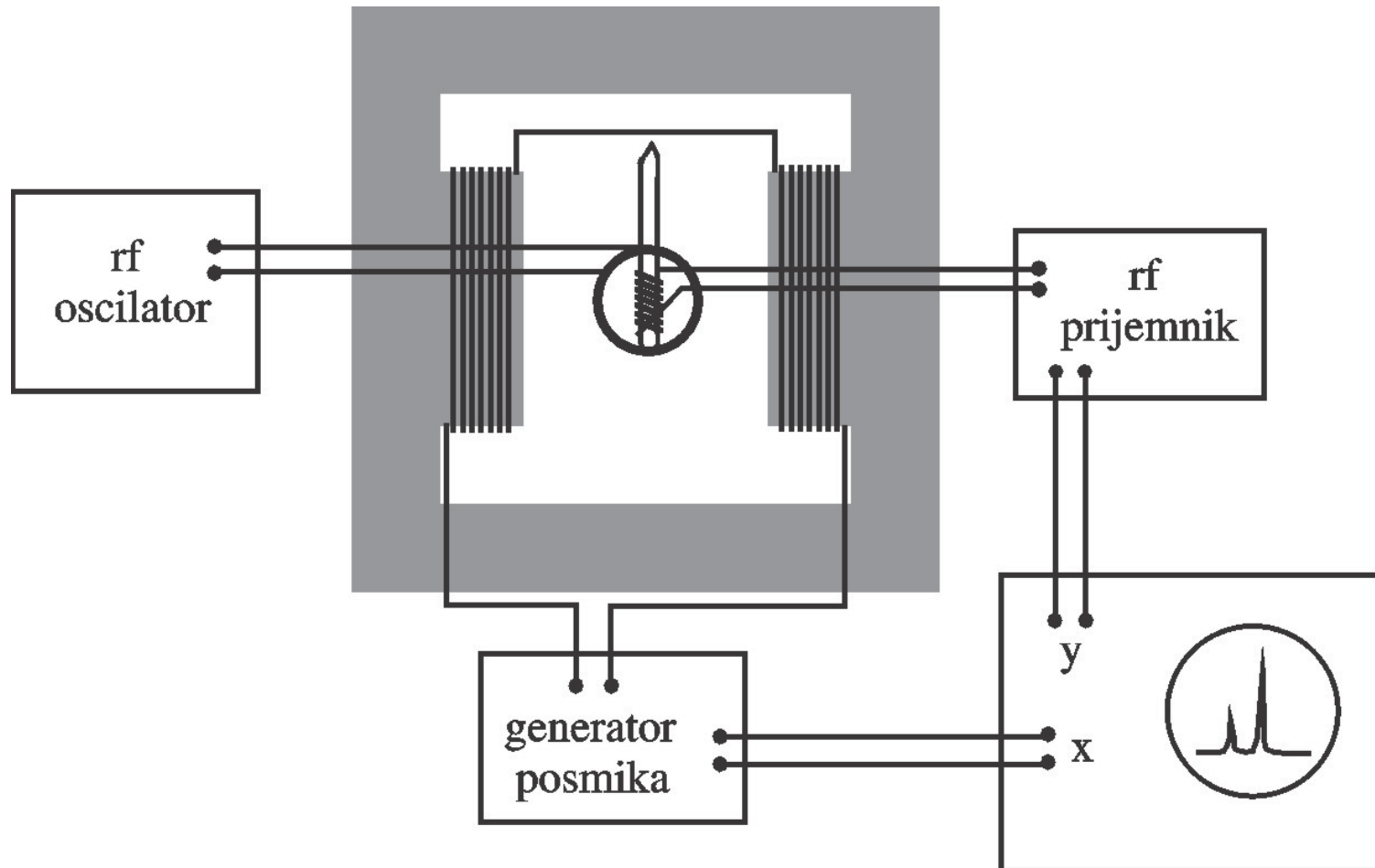
$$-g \mu_N B(m_I - 1) - (-g \mu_N B m_I) = h\nu$$

$$g \mu_N B = h\nu$$

$$\nu_L = \frac{g \mu_N B}{h}$$



Shema NMR spektrometra



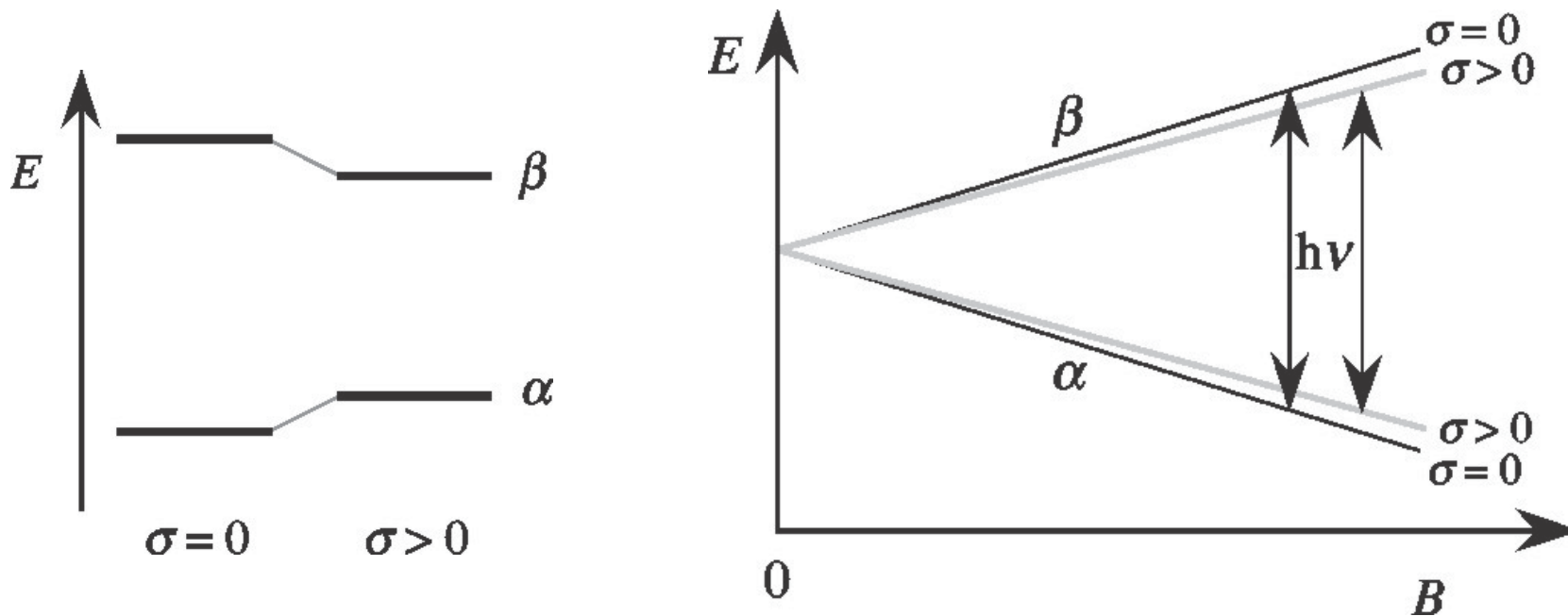
Kemijski pomak (kemijska okolina jezgre)

$$B = B_0(1 - \sigma)$$

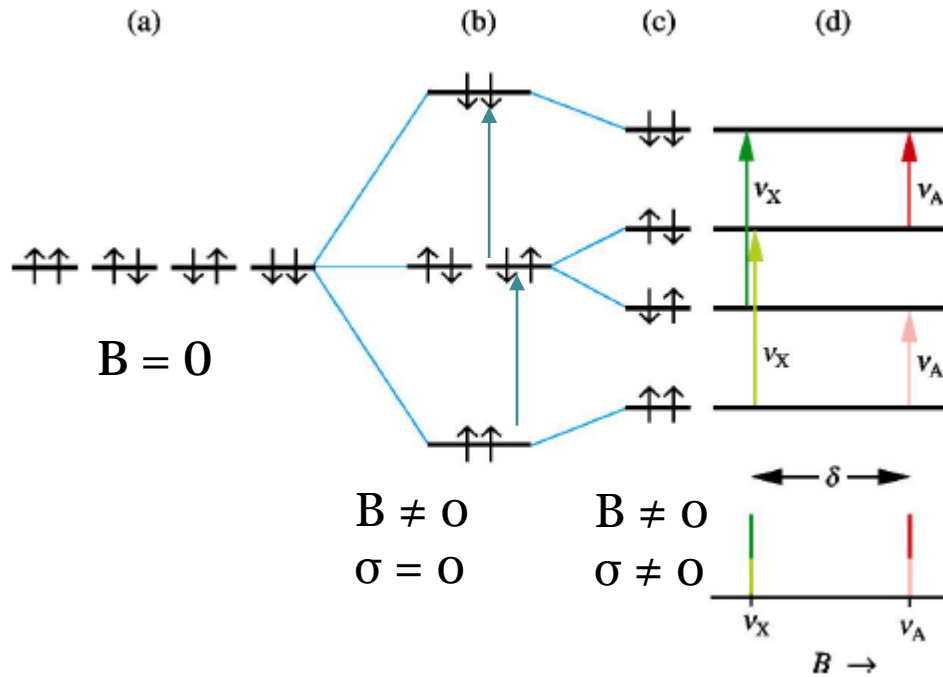
B – lokalno polje (umanjeno zbog elektronske gustoće, što je veća el. gustoća lokalno polje je manje)

B_0 – vanjsko polje (polje spektrometra)

σ – konstanta zasjenjenja (karakteristična za kem. okolinu u kojoj se jezgra nalazi)

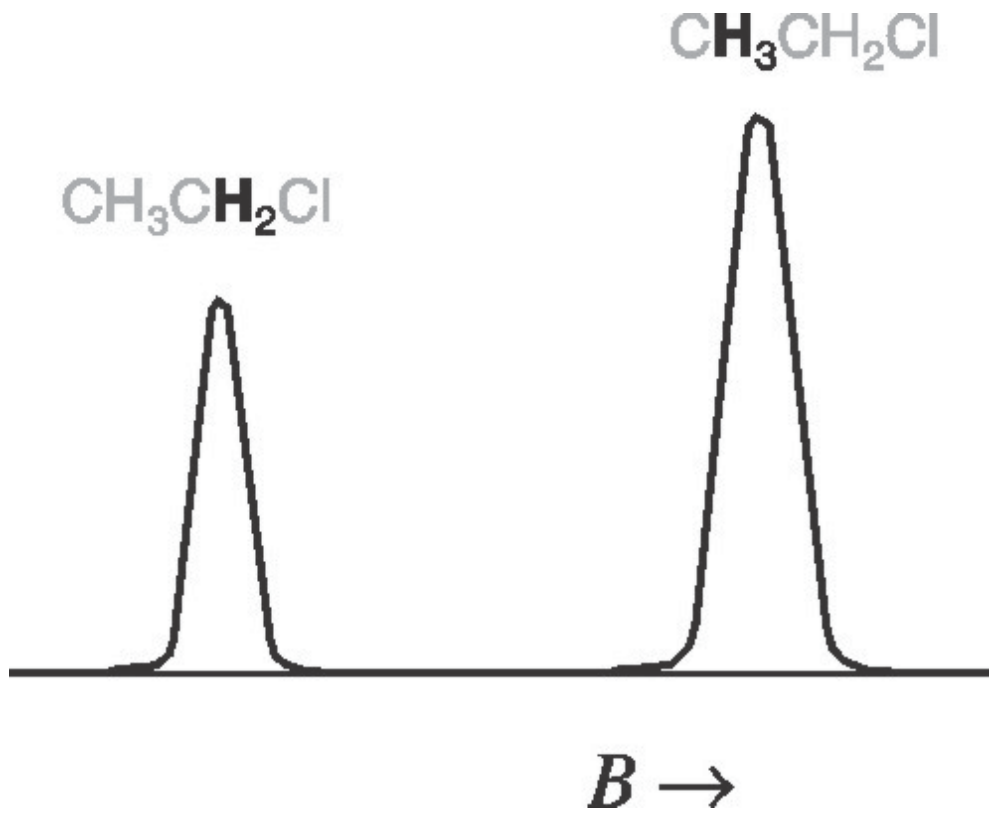


1) RAZINE SPINSKIH STANJA DVAJU PROTONA



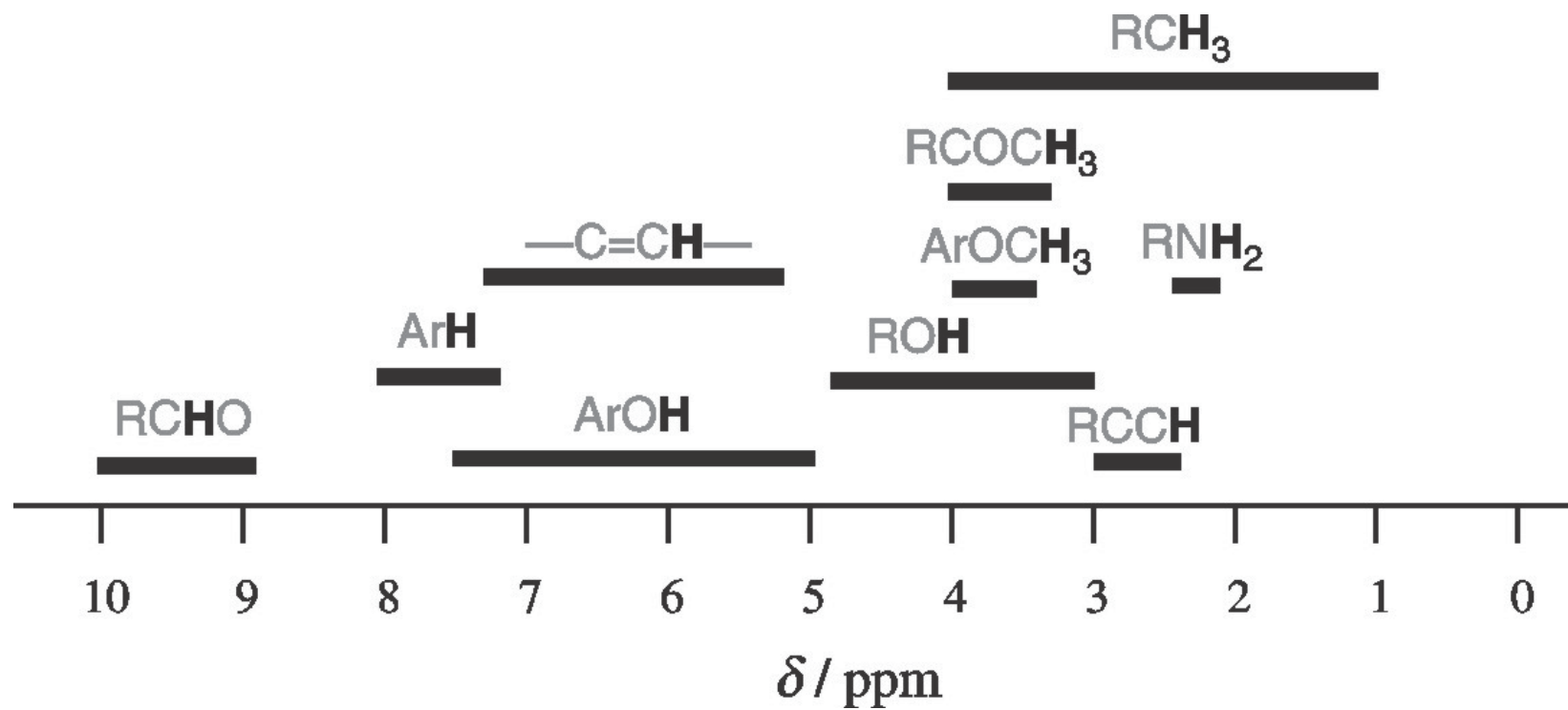
jedna linija u spektru

dvije linije u spektru

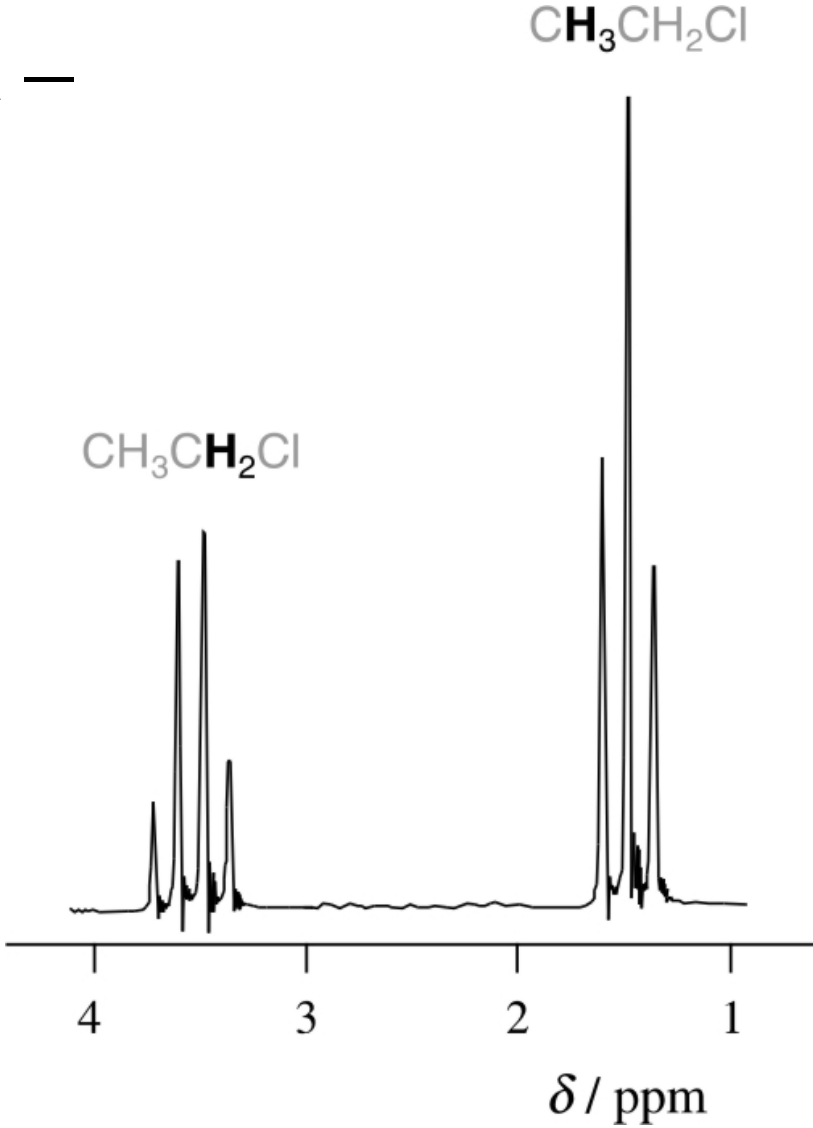


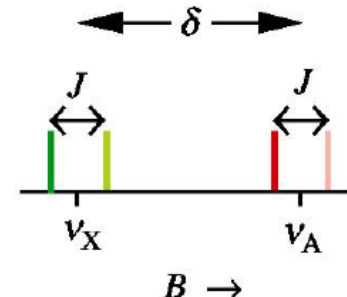
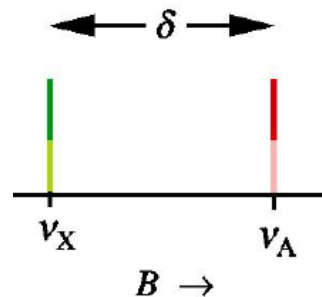
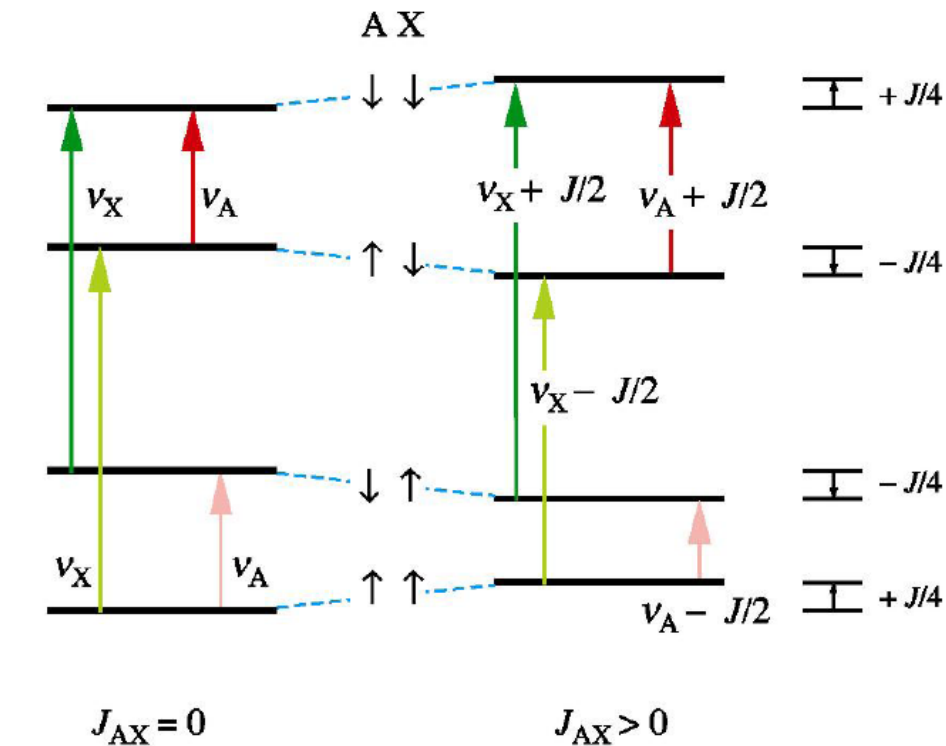
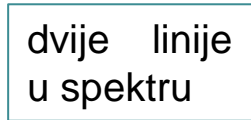
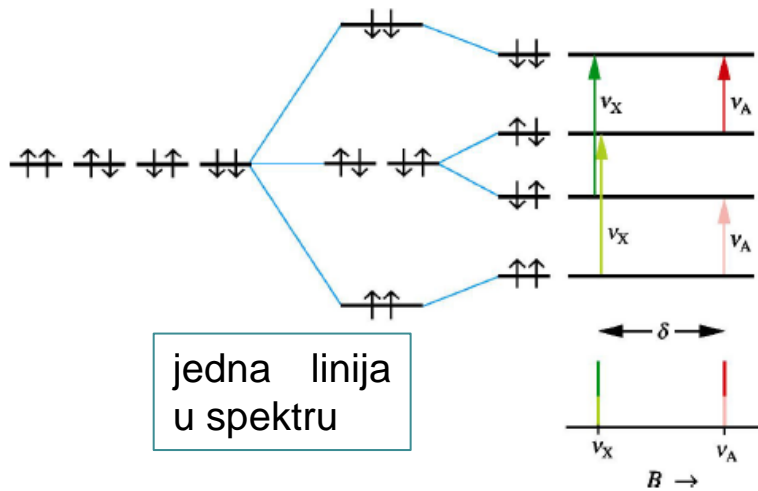
$$\delta_X = (\sigma_{\text{ref}} - \sigma_X) \times 10^6 \text{ ppm}$$

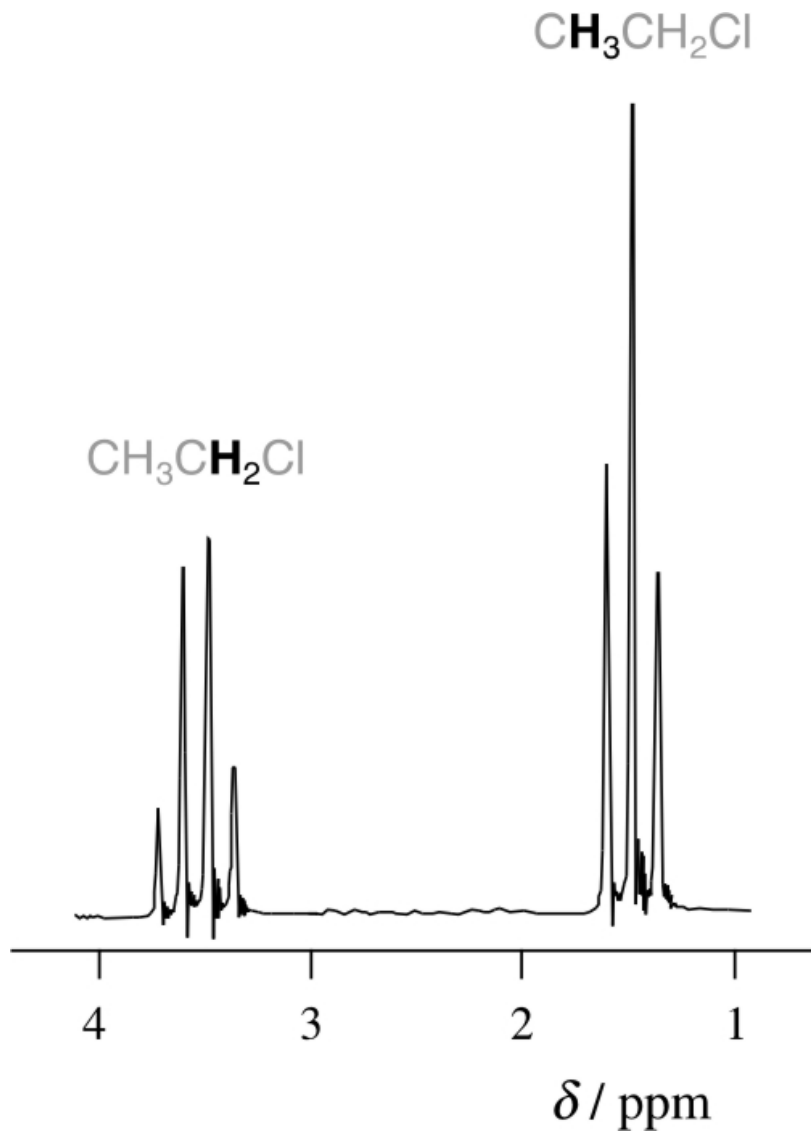
$$\delta_X \approx \frac{B_i - B_{\text{ref}}}{B_{\text{ref}}} \times 10^6 \text{ ppm} = \frac{B_0(1 - \sigma_X) - B_0(1 - \sigma_{\text{ref}})}{B_0(1 - \sigma_{\text{ref}})} \times 10^6 \text{ ppm}$$



Cijepanje signala – Sprega među spinovima







$\text{CH}_3 \longrightarrow$ dva susjedna protona (CH_2)

Orijentacije spina CH_2

$\alpha\alpha$	1	
$\alpha\beta$	}	2
$\beta\alpha$		
$\beta\beta$	1	

$\text{CH}_2 \longrightarrow$ tri susjedna protona (CH_3)

Orijentacije spina CH_3

$\alpha\alpha\alpha$	1	
$\alpha\alpha\beta$	}	3
$\alpha\beta\alpha$		
$\alpha\alpha\beta$		
$\beta\beta\alpha$	}	3
$\beta\alpha\beta$		
$\alpha\beta\beta$		
$\beta\beta\beta$	1	

Cijepanje linija - spin-spin sprega

N susjednih protona → N+1 LINIJA

Intenziteti: Pascalov trokut

							1	nula susjednih
						1	1	jedan susjedni
					1	2	1	dva susjedna
				1	3	3	1	tri susjedna
			1	4	6	4	1	...
	1	5	10	10	5	1		

MAGNETSKA REZONANCIJA

1. Koje jezgre imaju magnetski moment?
2. Koliko je mogućih orijentacija magnetskog momenta ako je nuklearni spinski kvantni broj $9/2$ (^{209}Bi)?
3. Koliko je mogućih orijentacija magnetskog momenta ako je nuklearni spinski kvantni broj 8 (^{180}Ta)?
4. Nabrojite neke jezgre s $I = 0$.
5. Nabrojite neke jezgre s $I = 1/2$.
6. Koja je čestica jači magnet: elektron ili proton?
7. Kakva je energija interakcije magnetskog momenta s magnetskim poljem?
8. Što je Larmorova frekvencija?
9. Kako ovisi separacija energijskih razina o magnetskoj indukciji primjenjenog magneta?
10. Što inducira prijelaze među nuklearnim spinskim razinama?
11. Koje se zračenje primjenjuje u NMR?

NMR

1. Kojeg su reda veličine magnetske indukcije kod NMR-spektrometara?
2. Što je uzrok kemijskom pomaku?
3. Što iskazuje konstanta zasjenjenja?
4. Zašto elektroni slabe utjecaj vanjskog polja na jezgre?
5. Kakav efekt na spektar ima zasjenjenje jezgara?
10. Kako susjedni atomi utječu na kemijski pomak?