

Az NMR spektroszkópia jelentősége

Szerkezeti kémia
 Szerves kémia: Minőségi analízis. Új vegyületek szerkezetvizsgálata. Enantiomer tisztaság vizsgálata.
 Természetes vegyületek szerkezetvizsgálata.
 Metabolitok vizsgálata

Fizikai-kémiai vizsgálatok:
 Gazda-vendég kölcsönhatások.
 Reakciókinetika

Makromolekulák háromdimenziós szerkezete:
 Peptidek, fehérjék, enzimek
 DNS/RNS, DNS/RNS komplexek
 Poliszaharidok

Gyógyszerkutatás: Receptor kötődési vizsgálatok

Orvostudomány: diagnosztika (Magnetic Resonance Imaging (MRI))

Mágneses atommag viselkedése mágneses térben

1.1. ábra A hidrogénatom energiájának mágneses mezőben. A mágneses mezőben a mágneses momentumok a mágneses mezőhöz viszonyítottan felbontódnak a különböző energiájú állapotokba.

1.2. ábra Az etanol (CH₃CH₂OH) NMR-spektruma közbélésben.

2. T. Kovács, S. S. Chakravarti és M. E. Peckard, Eds.: J. Chem. Phys., 1951, 19, 507.

ΔE = hν
 h = 6,626 × 10⁻³⁴ Js

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

Mágneses atommag viselkedése mágneses térben

$|I| = [I(I+1)]^{1/2} \hbar$
 $I_z = m\hbar$
 (m = -I, -I+1, ..., I-1, +I)
 $\mu = \gamma I$
 $E = -\mu B = -\mu_z B$
 $E = -m\hbar\gamma B$
 $\Delta E = \hbar\gamma B = h\nu$
 $\nu = \frac{\gamma B}{2\pi}$

I	Atommag
0	¹² C, ¹⁶ O
1/2	¹ H, ¹³ C, ¹⁵ N, ¹⁹ F, ²³ Si, ³¹ P
1	² H, ¹⁴ N
3/2	¹¹ B, ²³ Na, ³⁵ Cl, ³⁷ Cl
5/2	¹⁷ O, ²⁷ Al
3	¹⁰ B

Protonok száma	Neutronok száma	I
páros	páros	0
páratlan	páratlan	1/2 vagy 3/2 vagy 5/2 vagy ...
páros	páratlan	1/2 vagy 3/2 vagy 5/2 vagy ...
páratlan	páros	1/2 vagy 3/2 vagy 5/2 vagy ...

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

Mágneses atommag viselkedése mágneses térben

$|I| = [I(I+1)]^{1/2} \hbar$
 $I_z = m\hbar$
 (m = -I, -I+1, ..., I-1, +I)
 $\mu = \gamma I$
 $E = -\mu B = -\mu_z B$
 $E = -m\hbar\gamma B$
 $\Delta E = \hbar\gamma B = h\nu$
 $\nu = \frac{\gamma B}{2\pi}$

	$\gamma/10^7 \text{ T}^{-1} \text{ s}^{-1}$	ν/MHz	Természetes gyakoriság %
¹ H	26,75	400,0	99,985
² H	4,11	61,4	0,015
¹³ C	6,73	100,6	1,108
¹⁵ N	1,93	28,9	99,63
¹⁹ F	-2,71	40,5	0,37
³¹ P	-3,63	54,3	0,037
³⁵ Cl	25,18	376,5	100,0
³⁷ Cl	-5,32	79,6	4,70
¹¹¹ Bi	10,84	162,1	100,0

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

Rezonzanciafrekvenciák az NMR spektroszkópiában

γ-sugarak 10²²
 röntgen-sugarak 10²⁰
 ultraibolya 10¹⁶
 látható 10¹⁴
 infravörös 10¹²
 mikrohullámú 10¹⁰
 rádió-frekvenciás 10⁶

Mössbauer
 elektron-gerjesztési
 rezgési
 forgási
 NMR

600
500
400
300
200
100
0

10
8
6
4
2
0

aldehyd
 aromás
 olefin
 acetilén
 alifás

δ / ppm

ν / MHz

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

Az energiaszintek betöltöttsége

$\frac{n_{\text{felső}}}{n_{\text{alsó}}} = e^{-\Delta E/kT}$
 $\frac{n_{\text{felső}}}{n_{\text{alsó}}} = 1 - \frac{\Delta E}{kT}$
 $\frac{\Delta E}{kT} = 1 - \frac{n_{\text{felső}}}{n_{\text{alsó}}} = \frac{n_{\text{alsó}} - n_{\text{felső}}}{n_{\text{alsó}}}$
 $\frac{\Delta E}{2kT} = \frac{n_{\text{alsó}} - n_{\text{felső}}}{2n_{\text{alsó}}} \approx \frac{n_{\text{alsó}} - n_{\text{felső}}}{n_{\text{alsó}} + n_{\text{felső}}} = 3,2 \times 10^{-5}$

NMR: ΔE = hνB = 2,65 × 10⁻²³ J, ha B = 9,4 T
 k = 1,3807 × 10⁻²³ J/K
 ΔE/kT = 6,4 × 10⁻⁵, ha T = 300 K

Elektrongerjesztési spektroszkópia:
 ΔE = hν = 3,976 × 10⁻¹⁷ J, ha ν = 6 × 10¹⁶ Hz
 ΔE/kT = 9598, ha T = 300 K

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

Az atommagok árnyékolása és a kémiai eltolódás

$B = B_0 - B' = B_0(1 - \sigma)$
 $\nu = \frac{\gamma B_0(1 - \sigma)}{2\pi}$
 $\delta = 10^6 \frac{(\nu - \nu_{ref})}{\nu_{ref}}$
 $\delta = 10^6 \frac{(\sigma_{ref} - \sigma)}{1 - \sigma_{ref}} \approx 10^6 (\sigma_{ref} - \sigma)$

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

Kémiai eltolódás, példák

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

A spin-spin csatolás (skaláris csatolás, J-csatolás)

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

Spin-spin csatolás, az AM_nX_m rendszerek spektrumai (I = 1/2)

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

Háromkötéses skaláris csatolások

Karplus összefüggés:

$$^3J = A + B \cos \Theta + C \cos^2 \Theta$$

$A = 2$
 $B = -1$
 $C = 10$

	cisz	transz	
X = H	+11.5	+19.0	+8.0
X = Ph	+10.7	+17.5	+7.6
X = Cl	+7.4	+14.8	+7.2
X = CN	+11.8	+17.9	+7.6

	ax	eq	ax-ax	11.8	180°
		eq	ax-eq	3.9	60°
	ax	eq	eq-eq	3.9	60°

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3

NMR jel észlelése

$B_1 = C \cdot \cos(\omega_0 t)$

Hore, P. J.: Mágneses magrezonancia, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Debrecen-Budapest, 2004, ISBN 963 19 4426 3



