

18. fejezet

1. Mi a feltétele annak, hogy egy részecske ESR-aktív legyen?
2. Az elektronspin energiaszintjei mágneses térben. Kiválasztási szabály az ESR-átmenetekre.
3. Rezonancia-feltétel az ESR-spektroszkópiában.
4. Miből ered az ESR-spektrumok hiperfinomszerkezete?
5. Milyen kölcsönhatásokból tevődik össze a hiperfinom-kölcsönhatás?
6. Hogyan jellemezhető a dipólus-dipólus kölcsönhatás az elektron és a mag mágneses momentuma között?
7. Fermi-féle kontakt kölcsönhatás.
8. Spinpolarizáció.
9. Hogyan valósulhat meg az elektron és a mágneses magok közötti kölcsönhatás, ha a párosítatlan elektron a) s-pályán, b) p-pályán, c) sp^n hibridpályán van?
10. Valamely gyökben a párosítatlan elektron 9 protonnal van azonos erősségű kölcsönhatásban. Vázolja föl a gyök pálcika ESR-spektrumát, tüntesse fel az egyes vonalak intenzitását! $I_H = 1/2$ (A kölcsönhatásban lévő magok száma és magspinje ettől eltérő is lehet.)
11. Valamely gyökben két ekvivalens proton van, a hiperfinomcsatolási állandó 3 mT. A spektrum középpontja 330 mT-nál van. Mekkora térenél találhatók a spektrumvonalak, és mekkora intenzitásúak? $I_H = 1/2$
12. Valamely gyökben két proton van, a hiperfinomcsatolási állandók értéke 2, ill. 3 mT. A spektrum középpontja 330 mT-nál van. Mekkora térenél találhatók a spektrumvonalak, és mekkora intenzitásúak? $I_H = 1/2$
13. Mekkora mágneses tér kellene ahhoz, hogy egy ESR-spektrométerrel ($\nu=9\text{GHz}$) ^1H -NMR-t, míg egy 60 MHz-es NMR-készülékkel elektronspin-rezonanciát figyelhessünk meg? Az ^1H mag g-tényezője 5,586, $g_e=2,0023$, $\mu_N=5,051\cdot 10^{-27}\text{ J/T}$, $\mu_B=9,274\cdot 10^{-24}\text{ J/T}$, $h=6.626\cdot 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$.
14. Határozzuk meg egy mintában az α és β -spinállapot betöltési számainak arányát, ha $B=0,3\text{ T}$, a hőmérséklet pedig 25°C . $g_e=2,0023$, $\mu_B=9,274\cdot 10^{-24}\text{ J/T}$, $k=1,381\cdot 10^{-23}\text{ J/K}$.
15. Egy 9,2231 GHz-en működő spektrométerben az atomos hidrogén ESR-spektrumának a közepe 329,12 mT-nál van. Mekkora a H-atomok g-tényezője? $\mu_B=9,274\cdot 10^{-24}\text{ J/T}$, $h=6.626\cdot 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$.
16. Valamely gyök két ekvivalens protont tartalmaz, 3 vonalból álló ESR-spektrumában, amelyben a vonalak intenzitáseloszlása 1:2:1, a vonalak 330,2 mT, 332,5 mT és 334,8 mT térenél vannak. Mekkora a hiperfinomcsatolási állandó a protonokra? Mekkora a gyök g-tényezője, ha a spektrométer mérési frekvenciája 9,319 GHz? $\mu_B=9,274\cdot 10^{-24}\text{ J/T}$, $h=6.626\cdot 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$.
17. A 9,032 GHz-en működő ESR-spektrométerben a H-atom spektrumát alkotó két vonal 357,3 mT és 306,6 mT térenél mérhető. Mekkora a H-atomban a hiperfinomcsatolási állandó?
18. Adjuk meg a vonalak intenzitás-eloszlását a CH_3 -gyök ESR-spektrumában!
19. A benzol gyök-anionjára $g=2,0025$. Mekkora térenél keressük a rezonanciát, ha a műszer mérési frekvenciája 9,302 GHz?
20. Valamely gyök egyetlen mágneses magot tartalmaz, ESR-spektruma 4, egyenlő intenzitású vonalból áll. Mekkora a mag spinje?
21. A kereskedelmi forgalomban kapható ESR-spektrométerek némelyike 8 mm hullámhosszú mikrohullámú sugárzást használ. Mekkora mágneses tér szükséges ahhoz,

hogyan a rezonancia feltétele teljesüljön? $\mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24}$ J/T, $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ J·s, $c = 2,998 \cdot 10^8$ m/s.

22. Mely atommagok vizsgálhatók mágneses magrezonancia-spektroszkópiával?
23. Hányféleképpen orientálódhat egy I spinű mag mágneses térben? A magok energiaszintjei mágneses térben.
24. Speciális kiválasztási szabály a magátmenetekre. Rezonancia-feltétel az NMR-spektroszkópiában. Larmor-frekvencia.
25. Miért előnyös minél nagyobb mágneses teret alkalmazni az NMR-spektrométerekben?
26. Mi a kémiai eltolódás az NMR-spektroszkópiában? A kémiai eltolódás δ -skálája. Mi ennek az előnye? Az árnyékolási tényező fő összetevői.
27. Lamb-formula.
28. Szomszédcsoporthatás.
29. Mi hozza létre az NMR-spektrum finomszerkezetét?
30. Milyen kölcsönhatások révén valósul meg a spin-spin csatolás?
31. Mitől függ a spin-spin csatolási állandó nagysága? A spin-spin csatolási állandó előjele.
32. Mikor nevezzük az atommagok egy csoportját kémiai ekvivalensnek?
33. Mikor nevezzük az atommagok egy csoportját mágnesesen ekvivalensnek?
34. Elsőrendű NMR-spektrumok.
35. Másodrendű NMR-spektrumok. Milyen körülmények között válhatnak ezek elsőrendűvé?
36. Vázolja föl egy A_2X_4 homonukleáris spinrendszer pályika NMR-spektrumát, ha $I_A = I_X = 1/2$, $\delta(A_2) = 2$, $\delta(X_4) = 4$, a mérési frekvencia 60 MHz. Tüntesse föl a vonalak intenzitását is! (Az adatok bármelyike eltérő lehet a fentiektől.)
37. Spin-rács relaxáció. A mágneszettség z-irányú komponensének időbeli változása.
38. Spin-spin relaxáció. A mágneszettség y-irányú komponensének időbeli változása.
39. Az NMR-spektrumvonal félérték-szélessége.
40. Milyen cserefolyamatokat ismer az NMR-spektroszkópiában?
41. Egy molekulának több konformere van, amelyek egymásba alakulhatnak. Mi a feltétele annak, hogy az egyes konformerek NMR-jeleit külön-külön mérni lehessen?
42. Egy molekula konformereinek egyedi spektrumait akarjuk mérni, de a jelek egybeolvadnak. Hogyan kell változtatnunk a kísérleti körülményeket?
43. A ^{32}S -mag spinje $3/2$, g-tényezője pedig 0,4289. Határozza meg a magspinállapotok energiáját 7,500 T indukciójú mágneses térben! $\mu_N = 5,051 \cdot 10^{-27}$ J/T
44. Határozzuk meg, hogy 15,00 T indukciójú mágneses térben mekkora energiakülönbség van a ^{14}N -mag legmagasabb és legalacsonyabb spinállapota között. $I = 1$, $g = 0,4036$, $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ J·s.
45. Határozzuk meg, hogy milyen mágneses tér tesz eleget a rezonancia-feltételnek 150,0 MHz-es rádiófrekvenciás térrel besugárzott protonok esetében! $I = 1/2$, $g_N = 5,586$, $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ J·s.
46. Az acetaldehidben a CH_3 -csoport protonjainak kémiai eltolódása $\delta = 2,20$, a CHO -csoportbeli protoné pedig $\delta = 9,80$. Hány Hz frekvenciakülönbség van a két csoport protonjainak rezonanciajele között a) 60 MHz-en, b) 350 MHz-en működő spektrométer esetében?
47. Az előző feladat adatait felhasználva rajzoljuk fel a molekula pályika spektrumát a) 60 MHz-en, b) 350 MHz-en működő spektrométer esetében, ha a csatolási állandó $J = 2,90$ Hz.
48. Valamely molekula kétféle alakjának élettartama 200 ms. A két konformer rezonanciafrekvenciájának különbsége 90,0 Hz egy 100 MHz-es NMR-készülékben. Állapítsa meg, hogy az adott készülékben egybeolvad-e a két spektrumvonal!
49. Folytonos besugárzású NMR-készülékek működése.
50. Jel/zaj arány, feloldás, mérési idő a hagyományos NMR-készülékekben.

51. Impulzusüzemű NMR-készülékek működési elve.
52. Hogyan biztosítjuk a kívánt spektrális szélességet az impulzusüzemű NMR-készülékekben?
53. Mi a szabad indukciós jel (FID)?
54. Hogyan alakítják át a szabad indukciós jelet NMR-spektrummá?
55. Mi a $\pi/2$ - és a π -impulzus?
56. A T_1 spin-rács (longitudinális) relaxációs idő meghatározása impulzusüzemű NMR-készülékben.
57. A spin-ekho kísérlet.
58. A T_2 spin-spin (transzverzális) relaxációs idő meghatározása impulzusüzemű NMR-készülékben.