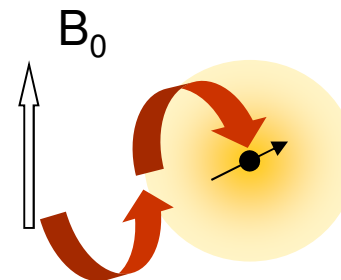


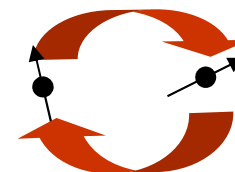
NMR interakce

Magnetické povahy

Chemický posuv



Přímá dipól-dipólová interakce



Nepřímá dipól-dipólová interakce
J-coupling

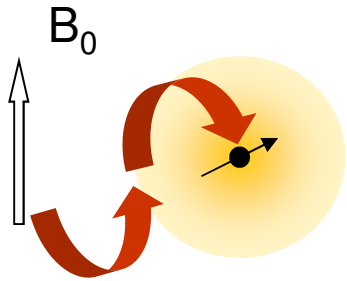


Elektrické povahy

Kvadrupolární interakce

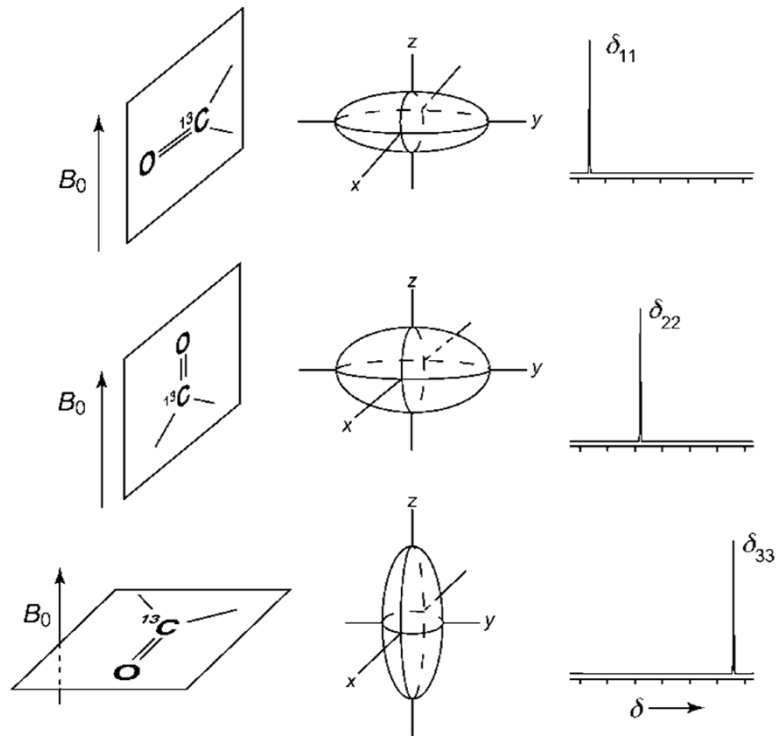
pro jádra se spinem $>1/2$



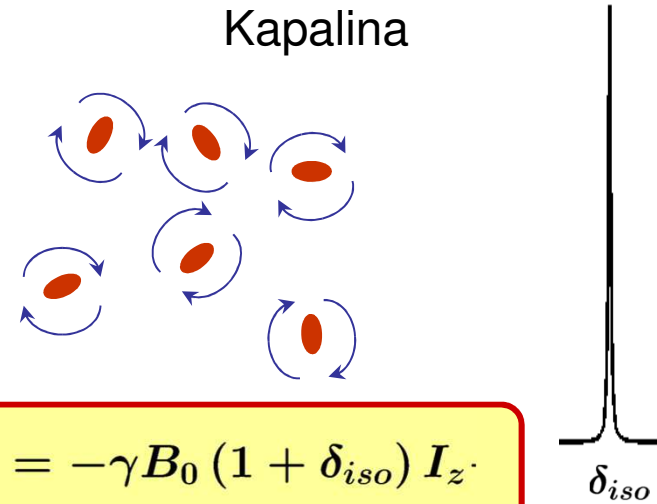


Chemický posun

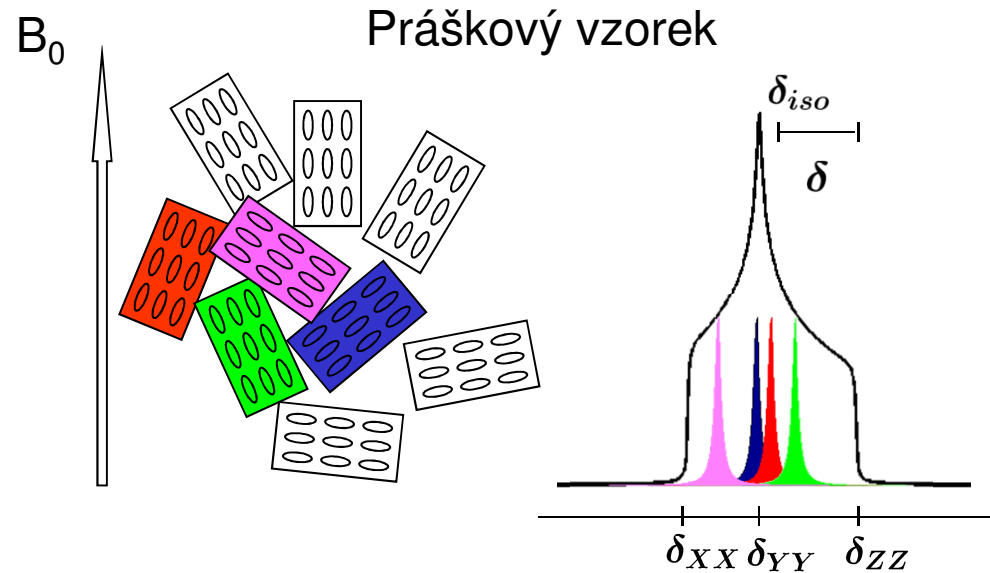
Orientačně závislý stínící efekt elektronů

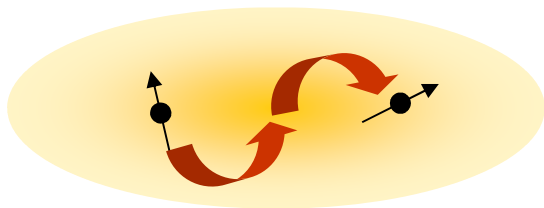


izotropní část δ_{iso}
 anizotropie δ
 asymetrie η

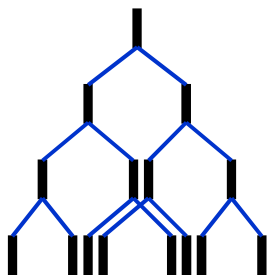


$$H_{CS} = -\gamma B_0 (1 + \delta_{iso}) I_z$$





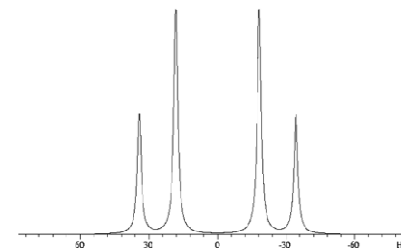
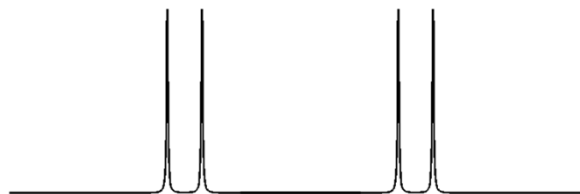
System štěpení signálů



J vazba

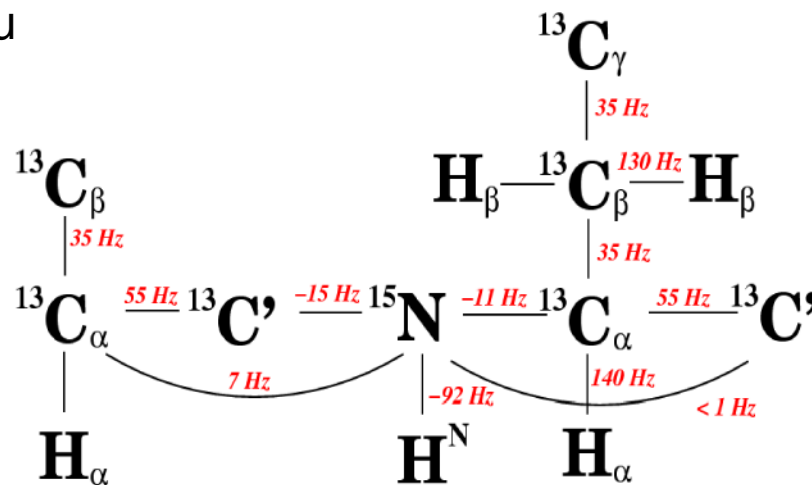
$$H = \pi 2I_Z S_Z$$

$$H = 2\pi J I \cdot S$$

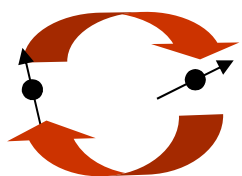


slabá J vazba – spektrum 1. řádu

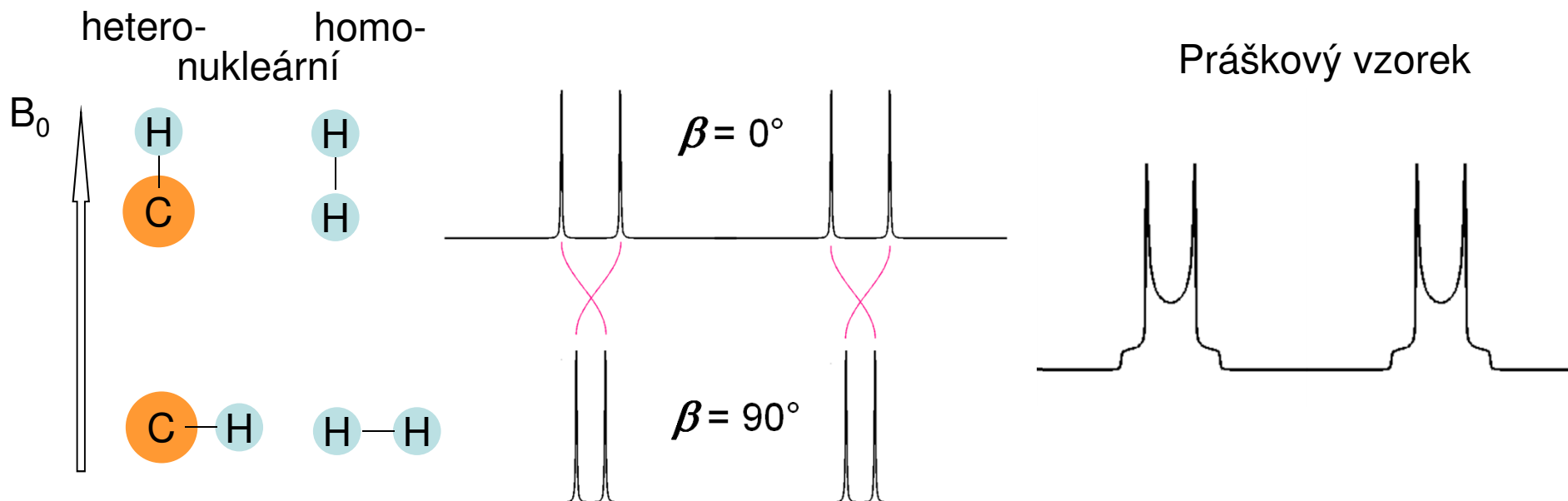
J vazby v proteinu



*přenos polarizace,
korelační spektra*



Přímá dipól-dipólová interakce



$$H_{DD} = -\frac{\mu \gamma_i \gamma_j}{4\pi r_{ij}^3} \frac{3 \cos^2 \beta - 1}{2} [3I_z S_z - I \cdot S]$$

nulová izotropní část

➔ neprojevuje se přímo ve spektrech kapalin

➔ nejvýznamnější relaxační mechanismus

➔ základní efekt využívaný při stanovování 3D struktury

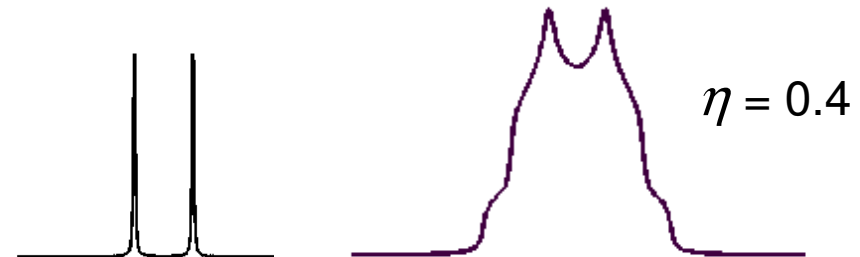
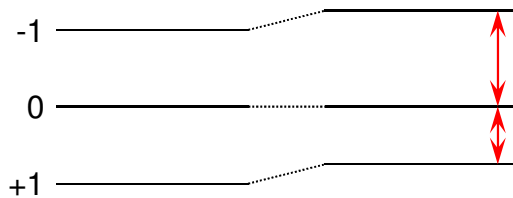
Kvadrupolární interakce



Nejsilnější interakce → často nutná poruchová teorie vyšších řádů

nulová izotropní část

Příklad: ^2H , spin $I = 1$



V prvním řádu:

$$H_Q = \frac{3\chi}{8I(2I - 1)} \left(3 \cos^2 \beta - 1 - \frac{1}{2} \eta \sin^2 \beta \cos 2\alpha \right) [3I_z - I \cdot I]$$

→ neprojevuje se přímo ve spektrech kapalin

Kvadrupolární interakce



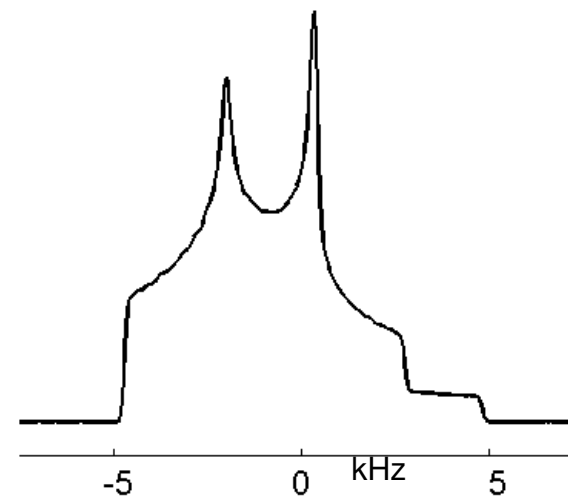
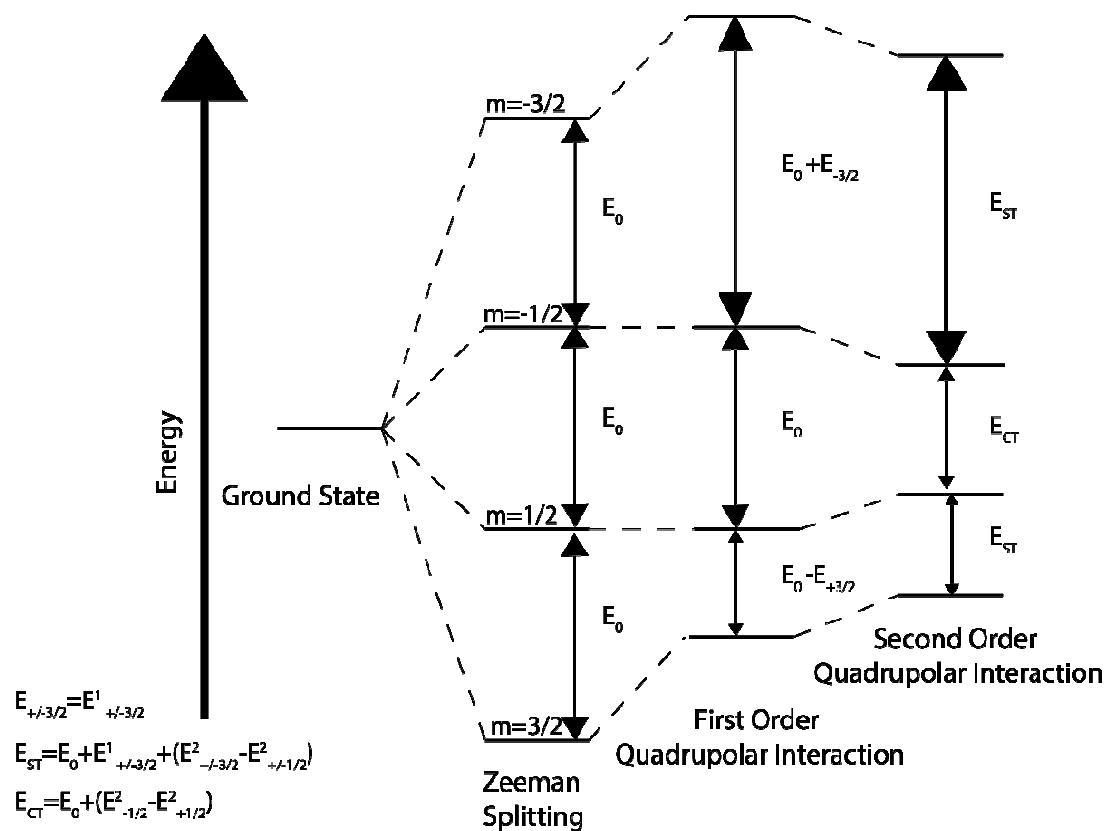
large quadrupolar interaction

Na ($S=3/2$)

infinite MAS

central transition -

- second order broadening

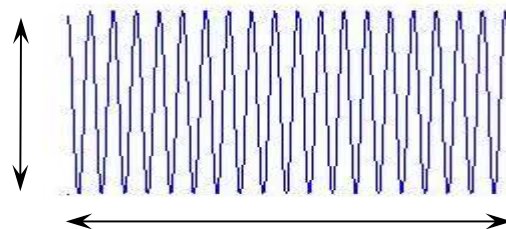


➔ neprojevuje se přímo ve spektrech kapalin

Produktové operátory a rf puls

$$H_{RF} = \omega_1 I_\alpha$$

amplituda
 ω_1

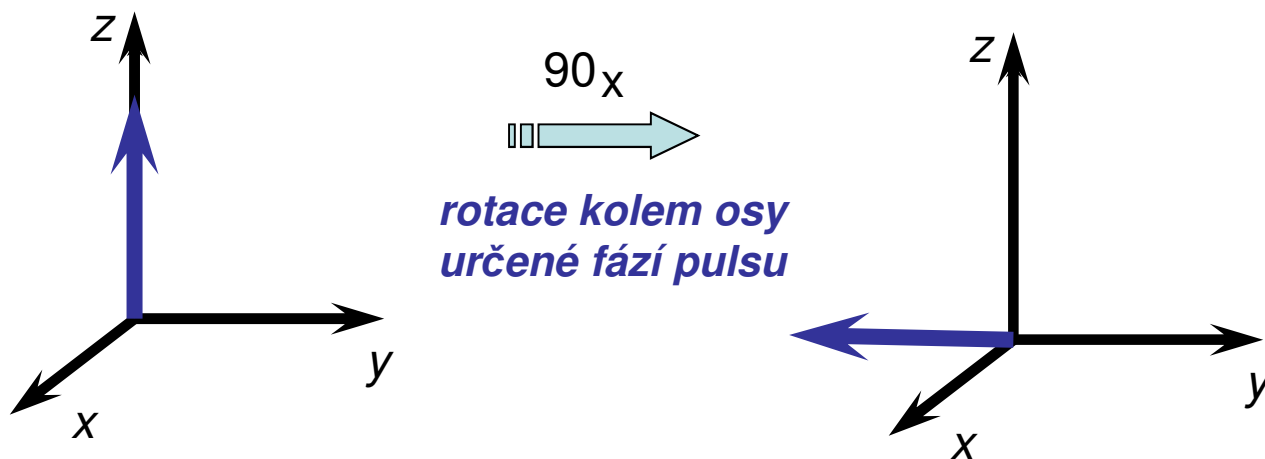


frekvence
 ω_{rf}

fáze α
x, y, -x, -y

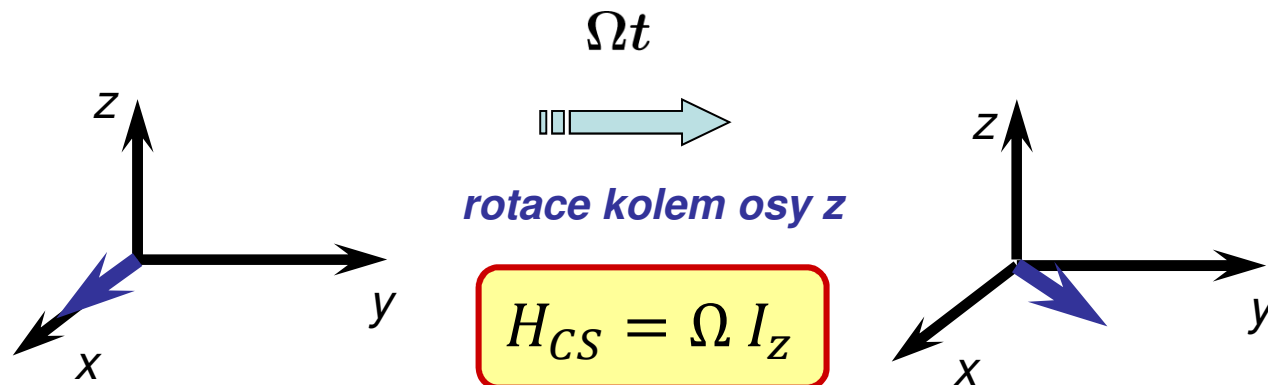
délka
 τ_p

sklápěcí úhel $\varphi = \omega_1 \tau_p$



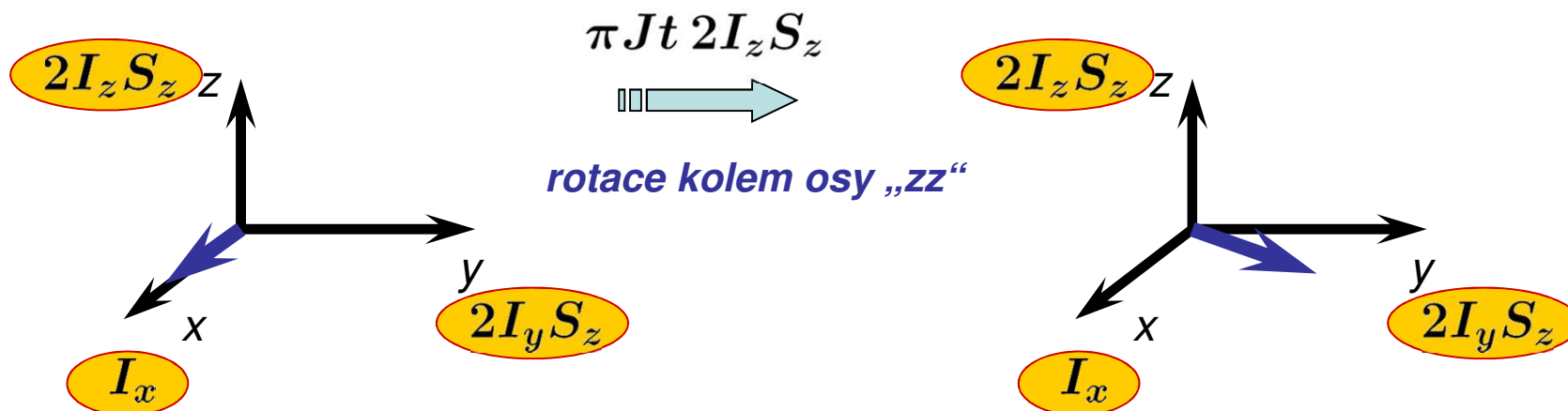
I_z		$I_z \cos \varphi$	\pm	$I_{x,y} \sin \varphi$
$I_{x,y}$	$\xrightarrow{\varphi_{y,x}}$	$I_{x,y} \cos \varphi$	\mp	$I_z \sin \varphi$
$I_{y,x}$		$I_{y,x}$		

Produktové operátory a chem. posun



$$\begin{array}{l} I_z \\ I_{x,y} \end{array} \xrightarrow{\Omega t} \begin{array}{l} I_z \\ I_{x,y} \cos \Omega t \pm I_{y,x} \sin \Omega t \end{array}$$

Produktové operátory a J vazba



$$H_J = \pi 2I_z S_z$$

$ \begin{array}{l} I_z \\ 2I_x S_y \\ I_{x,y} \\ 2I_{x,y} S_z \end{array} $	$\xrightarrow{\pi J t 2I_z S_z}$	$ \begin{array}{l} I_z \\ 2I_x S_y \\ I_{x,y} \cos \pi J t \quad \pm 2I_{y,x} S_z \sin \pi J t \\ 2I_{x,y} S_z \cos \pi J t \quad \pm I_{y,x} \sin \pi J t \end{array} $
--	----------------------------------	---

Spinové echo

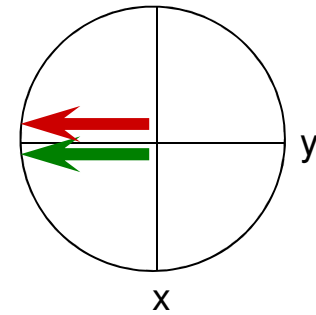
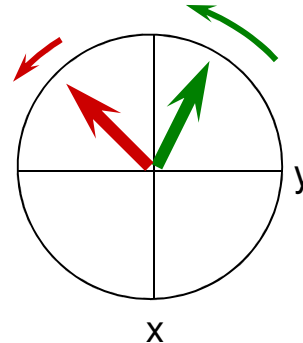
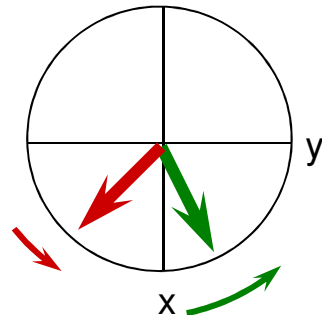
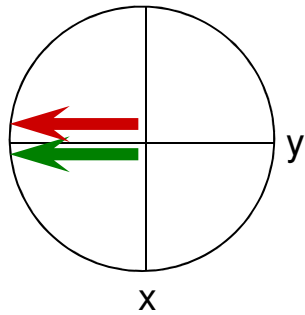
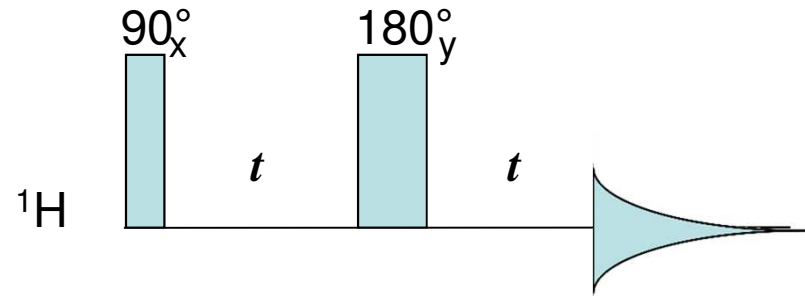
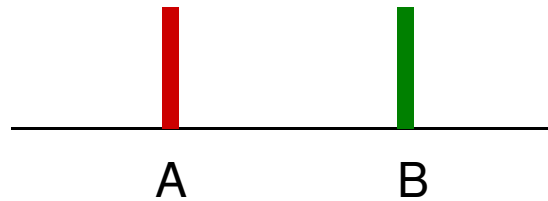
homonukleární systém

I_1, I_2



Spinové echo

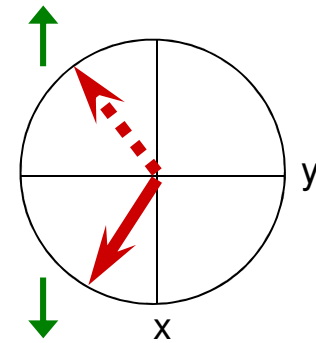
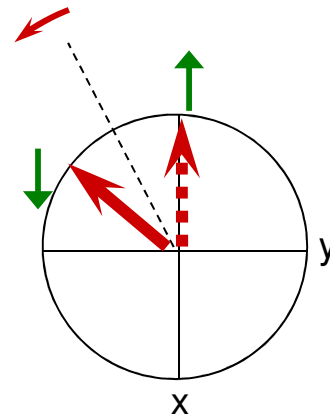
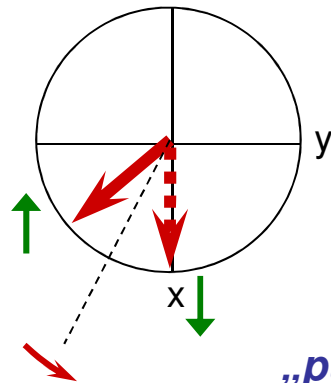
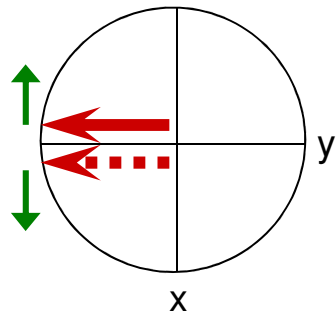
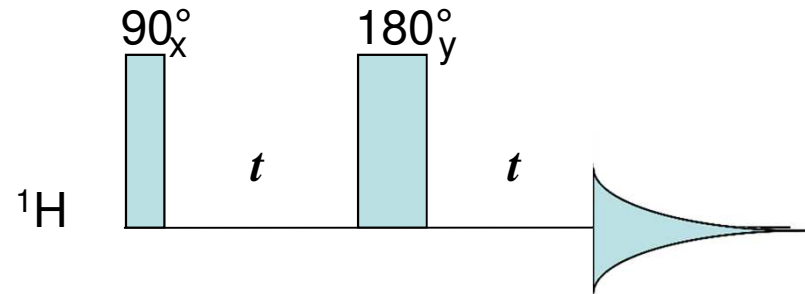
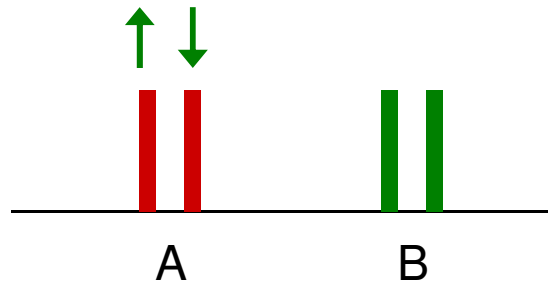
Dva vodíky BEZ J interakce



refokusován chemický posun
a stejně nehomogenity B_0

Spinové echo

Dva vodíky s J interakcí



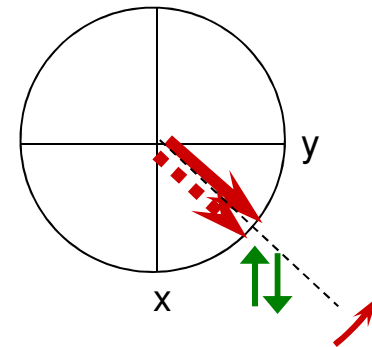
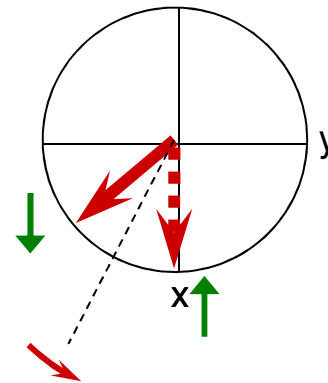
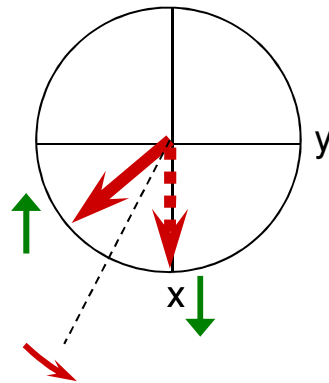
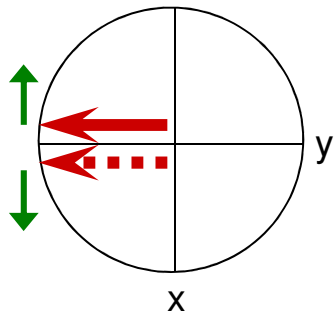
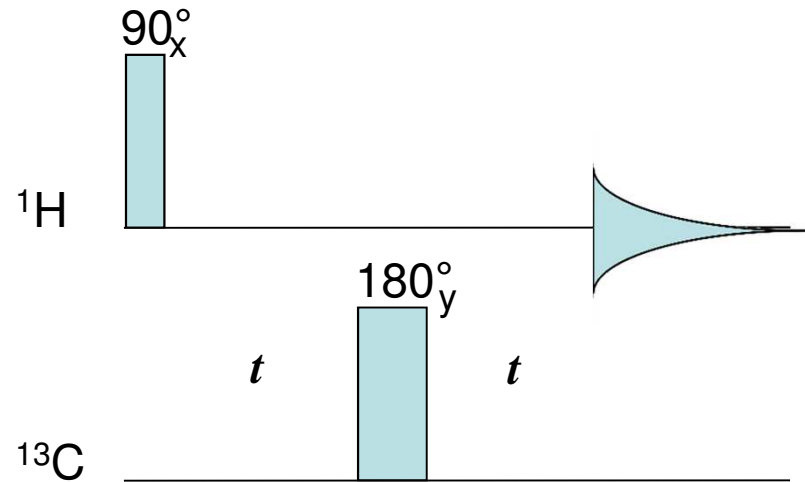
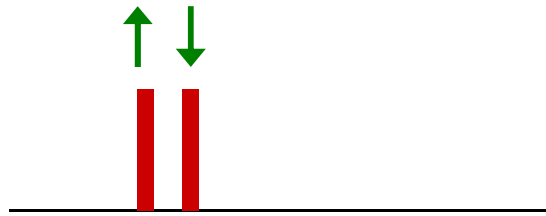
„puls překlopí spinové stavy“

chemický posun refokusován

J vazba stále aktivní

Spinové echo

Vodík a uhlík s J interakcí



„puls překlopí spinové stavy“

chemický posun stále aktivní

J vazba refokusována

Analýza pulsních sekvencí

Trik pro 180° pulsy

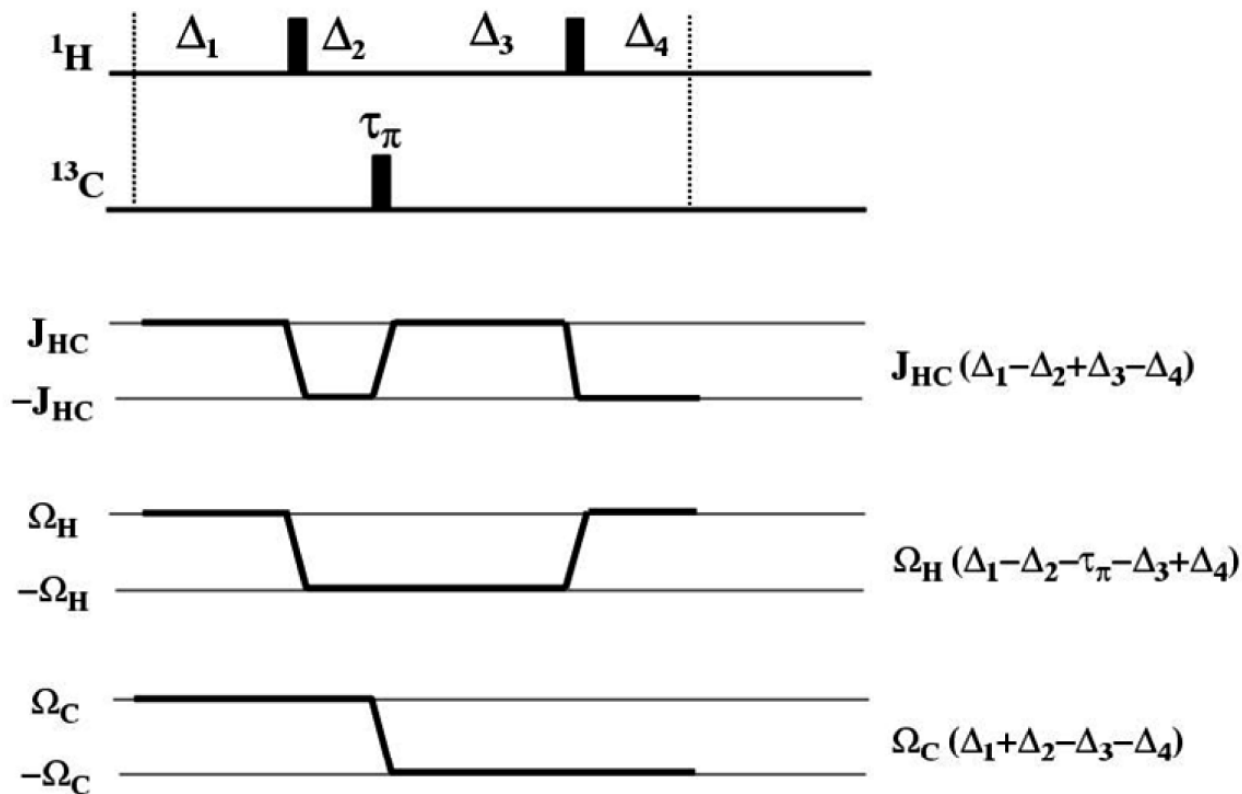
chem. posuv

$$\Omega t I_z$$

J interakce

$$\pi J t 2 I_z S_z$$

za každé jádro co pocítí puls
změnit znaménko



Spinové echo

homonukleární systém

I_1, I_2



chemický posuv po dobu 2τ

J interakce po dobu 2τ

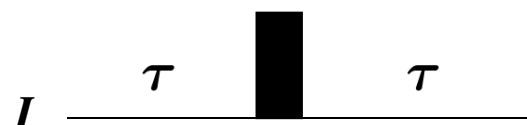


chemický posuv refokusován

J interakce po dobu 2τ

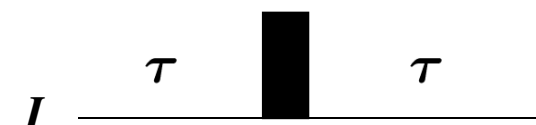
heteronukleární systém

I, S



chemický posuv S po dobu 2τ , I refokusován

J interakce refokusována



chemický posuv refokusován

J interakce po dobu 2τ