

O B S A H

<u>1</u>	<u>PRINCIP METODY MAGNETICKÉ REZONANCE</u>	9
1.1	Moment hybnosti a elektromagnetické momenty volného atomu a atomového jádra	10
1.1.1	Moment hybnosti a magnetický moment volného atomu	10
1.1.2	Jaderné momenty	15
1.1.2.1	Jaderný spin a jaderný magnetický moment	16
1.1.2.2	Elektrický kvadrupólový moment	18
1.2	Chování gyromagnetické částice v magnetickém poli, jev magnetické rezonance	24
1.2.1	Elementární kvantový popis	24
1.2.1.1	Gyromagnetická částice ve statickém magnetickém poli	24
1.2.1.2	Vliv časově proměnného pole, jev magnetické rezonance	26
1.2.1.3	Střední hodnota magnetického momentu	27
1.2.2	Klasický fenomenologický popis	29
1.2.2.1	Pohyb ve statickém magnetickém poli	30
1.2.2.2	Pohyb za přítomnosti kruhově polarisovaného pole	32
1.2.2.3	Pohyb v pulsním kruhově polarisovaném poli	33
1.3	Magnetická rezonance makroskopického souboru neinteragujících částic	34
1.3.1	Paramagnetismus souboru neinteragujících gyromagnetických částic	35
1.3.2	Podmínky pozorování magnetické rezonance, spin-mřížková relaxace	36
<u>2</u>	<u>ZÁKLADY FENOMENOLOGICKÉ TEORIE MAGNETICKÉ REZONANCE</u>	40
2.1	Teorie odezvy lineárního systému	40
2.1.1	Zobecněné materiálové vztahy v časoprostorové reprezentaci	42
2.1.2	Zobecněné materiálové vztahy v reprezentaci (\vec{k}, ω)	44
2.1.3	Kramersovy-Kronigovy relace	47
2.1.4	Příklady	49

2.2	Blochovy rovnice	52
2.2.1	Formulace Blochových rovnic	53
2.2.2	Stacionární řešení Blochových rovnic	55
2.2.2.1	Transversální susceptibilita	56
2.2.2.2	Nasycování signálu	57
2.2.2.3	Vliv nehomogenity podélného pole	59
2.2.3	Nestacionární řešení Blochových rovnic	61
2.2.3.1	Volná precese	61
2.2.3.2	Dvouimpulsové spinové echo	63
2.2.3.3	Měření T_1 ze signálu volné precese	64
2.2.3.4	Stimulované echo	66
3	<u>EXPERIMENTÁLNÍ TECHNIKA</u>	67
3.1	Obecné charakteristiky experimentální techniky a metody magnetické rezonance	67
3.2	Detekce a zpracování signálu magnetické rezonance	70
3.2.1	Spinový detektor	70
3.2.2	Detekce signálu	76
3.2.3	Metody snímání spekter	79
3.2.4	Možnosti zlepšení poměru signál-šum	84
3.3	Spektrometry magnetické rezonance	88
3.3.1	Mikrovlnný spektrometr	88
3.3.2	Spektrometr pro měření JMR v pevných látkách	90
3.3.3	Kontinuální spektrometr JMR vysokého rozlišení	91
3.3.4	Impulsní spektrometr JMR	93
4	<u>SPEKTRA JMR V PEVNÝCH LÁTKÁCH A KAPALINÁCH</u>	97
4.1	Dipól-dipólová interakce	97
4.1.1	Dipól-dipólová interakce v pevných látkách, šířka křivky	99
4.1.1.1	Metoda momentů	102
4.1.1.2	Užití JMR při studiu struktury a molekulárního pohybu v pevných látkách	105
4.1.1.3	Metody vysokého rozlišení v pevných látkách	113

4.1.2	Dipól-dipólová interakce v kapalinách	115
4.1.2.1	Pohybové zúžení	115
4.1.2.2	Spin-mřížková relaxace, šířka čáry	118
4.1.2.3	Vliv paramagnetických příměsí	126
4.1.2.4	Relaxační spektroskopie	128
4.2	Magnetická integrace jader a elektronů	130
4.2.1	Chemický posuv a nepřímá spin-spinová interakce	130
4.2.2	Základy analýzy spekter JMR vysokého rozlišení	138
4.2.3	Projevy chemických procesů ve spektrech JMR vysokého rozlišení	145
4.2.4	Pomocné metody analýzy spekter vysokého rozlišení	149
4.3	Kvadrupólová interakce	153
4.3.1	Vliv kvadrupóloví interakce ve spektrech JMR v pevných látkách	153
4.3.2	Kvadrupólová interakce v kapalinách	156
<u>5</u>	<u>ELEKTRONOVÁ PARAMAGNETICKÁ REZONANCE</u>	158
5.1	Úvod	158
5.2	Základy teorie spekter EPR, spinový hamiltonián	159
5.2.1	Spinový hamiltonián volného elektronu	160
5.2.2	Spinový hamiltonián atomu v kondensované látce	161
5.2.3	Tvar a šířka spektrálních čar	163
5.2.4	Spinový hamiltonián s hyperjemnou strukturou	166
5.2.4.1	Anizotropní dipolární hyperjemná interakce	167
5.2.4.2	Izotropní hyperjemná interakce	169
5.3	EPR spektra organických volných radikálů v roztoku	170
5.3.1	Energetické hladiny a dovolené EPR přechody	170
5.3.1.1	Spinový hamiltonián	170
5.3.1.2	EPR spektrum radikálů obsahujícího jedno jádro se spinem $I = 1/2$	171
5.3.1.3	Zobecnění pro případ většího počtu jader se spinem $I > 1/2$	175
5.3.2	Souvislost velikosti izotropních štěpících konstant s elektronovou strukturou radikálů	177

5.3.2.1	Spinová hustota	178
5.3.2.2	Izotropní hyperjemná interakce s α -protony	179
5.3.2.3	Izotropní hyperjemná interakce s β -protony	180
5.4	EPR spektra radikálů v pevné fázi	182
5.4.1	Spinový hamiltonián	182
5.4.2	Radikál s anizotropním g-faktorem bez hyperjemné interakce	182
5.4.3	Radikál s izotropním g-faktorem a anizotropní hyperjemnou interakcí	184
5.5	EPR spektra radikálů obsahujících dva nepárové elektrony .	187
5.5.1	Energetické stavy dvojice nepárových elektronů	187
5.5.2	EPR spektra radikálů v tripletním stavu	188
5.5.3	EPR spektra biradikálů	190
5.6	Aplikace metody EPR a technika měření EPR spekter	192
5.6.1	Nejdůležitější oblasti aplikace metody EPR	192
5.6.2	Měření koncentrace paramagnetických molekul, citlivost metody	193
5.6.3	Rozlišení struktury EPR spekter	193
5.6.4	Měření EPR spekter radikálů s omezenou dobou života	194