

Kärnspinn

Kärnspinn, I , fås genom summering av nukleonernas spinn, och antar värden i intervallet $0 \leq I \leq 9/2$ för de flesta element (högsta värdet är $I = 8$).

Table 1.2 Rules for predicting nuclear spin quantum numbers (I) from the numbers of protons and neutrons in a nucleus

Number of protons	Number of neutrons	I
even	even	0
odd	odd	1 or 2 or 3 or ...
even	odd	$\frac{1}{2}$ or $\frac{3}{2}$ or $\frac{5}{2}$ or ...
odd	even	$\frac{1}{2}$ or $\frac{3}{2}$ or $\frac{5}{2}$ or ...

Kärnspinn har samma egenskaper som andra rörelsemängdsmoment:

$$|\bar{L}_I| = \sqrt{I(I+1)}\hbar$$

$$L_z = m_I \hbar$$

$$m_I = I, I-1, \dots, -I$$

Table 1.1 Nuclear spin quantum numbers (I) of some commonly occurring nuclides

I	Nuclide
0	^{12}C , ^{16}O
$\frac{1}{2}$	^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P
1	^2H , ^{14}N
$\frac{3}{2}$	^{11}B , ^{23}Na , ^{35}Cl , ^{37}Cl
$\frac{5}{2}$	^{17}O , ^{27}Al
3	^{10}B

Table 1.3 Gyromagnetic ratios, NMR frequencies (in a 9.4 T field), and natural abundances of selected nuclides

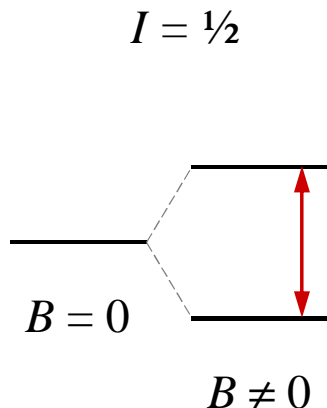
	$\gamma/10^7\text{T}^{-1}\text{s}^{-1}$	ν/MHz	Natural abundance/%
^1H	26.75	400.0	99.985
^2H	4.11	61.4	0.015
^{13}C	6.73	100.6	1.108
^{14}N	1.93	28.9	99.63
^{15}N	-2.71	40.5	0.37
^{17}O	-3.63	54.3	0.037
^{19}F	25.18	376.5	100.0
^{29}Si	-5.32	79.6	4.70
^{31}P	10.84	162.1	100.0

Kärnspinn

Kärnspinnmomentet är ca 1/1000 av det elektroniska spinnmomentet

- Kärnspinn har liten (ingen) inverkan på elektronstrukturen eller de kemiska egenskaperna.
- Kärnspinnen blir å andra sidan väldigt känsliga för variationer i elektronstruktur hos en molekyl \Rightarrow Analytiska möjligheter!

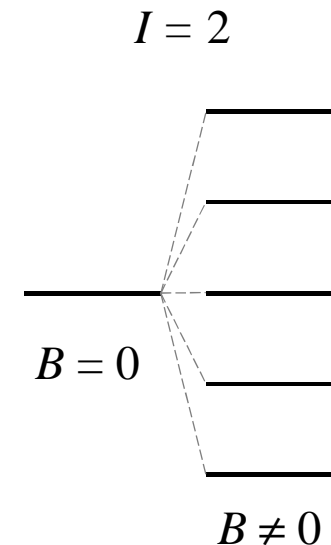
Degenerationen för ett givet kvanttal I är $2I+1$, vilket också ger antalet nivåer i ett externt magnetfält. Kärnor med $I = 1/2$ är vanligast i magnetresonansstudier.



Exempel på kärnor med $I = 1/2$:

^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P

Separationen mellan energinivåerna är direkt proportionell mot det externa magnetfältet!



Magnetresonans (MR)

Studier av växelverkan mellan magnetiska moment och elektromagnetisk strålning, under påverkan av externa magnetfält, och studier av övergångar mellan magnetiskt inducerade energinivåer.

$\Delta E \ll kT$ vid rumstemperatur, dvs magnetiska tillstånd är ungefär lika populerade.

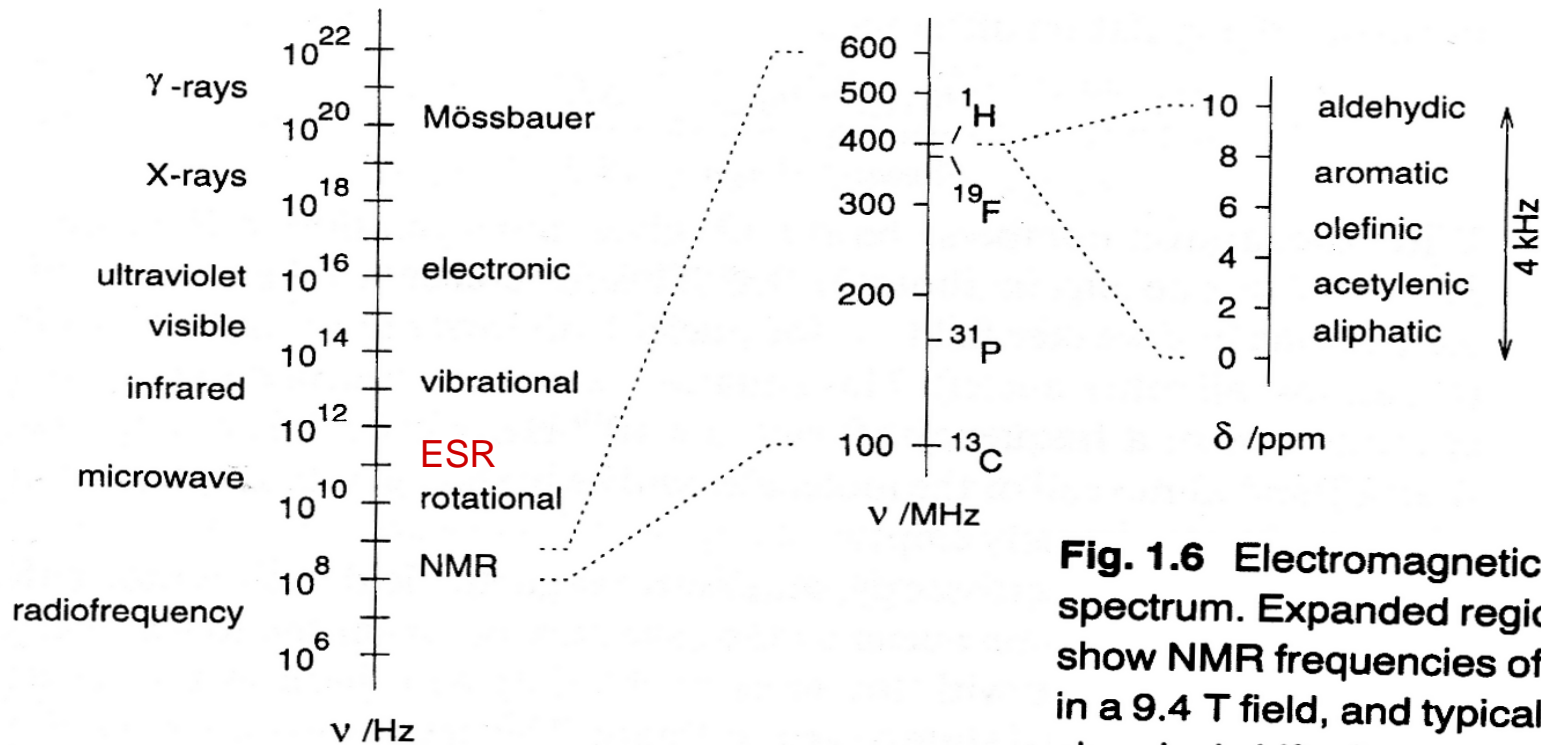


Fig. 1.6 Electromagnetic spectrum. Expanded regions show NMR frequencies of nuclei in a 9.4 T field, and typical ^1H chemical shifts (in parts per million, ppm).