

Электронды парамагнитті резонанс әдісі (ЭПР)

* **Электронды парамагнитті резонанс (ЭПР) әдісі** – парамагнитті бөлшектердің электромагнитті сәулелерді резонансты түрде жұту құбылысы. ЭПР құбылысын Ресей ғалымы **Е.К.Завойский** 1944 жылы ашқан. Электронның механикалық және магниттік моменттері.

* Магниттік өрісті берген кезде жүйедегі төмендеу алынады да, **өріс** бағытындағы **магниттік** моменттік белгілі мәндерге ие болады, деңгей энергиясы (E) ыдырайды. Ондағы туындайтын деңгейшелердің арақашықтығы өрістің кернеулігіне тәуелді болады:

$$* E_1 - E_2 = \Delta E = g\beta H$$

* мұндағы **g** - спектроскопиялық **ыдырау** факторы. **μ** - Бор магнитоны. **H** - өрістің кернеулігі.

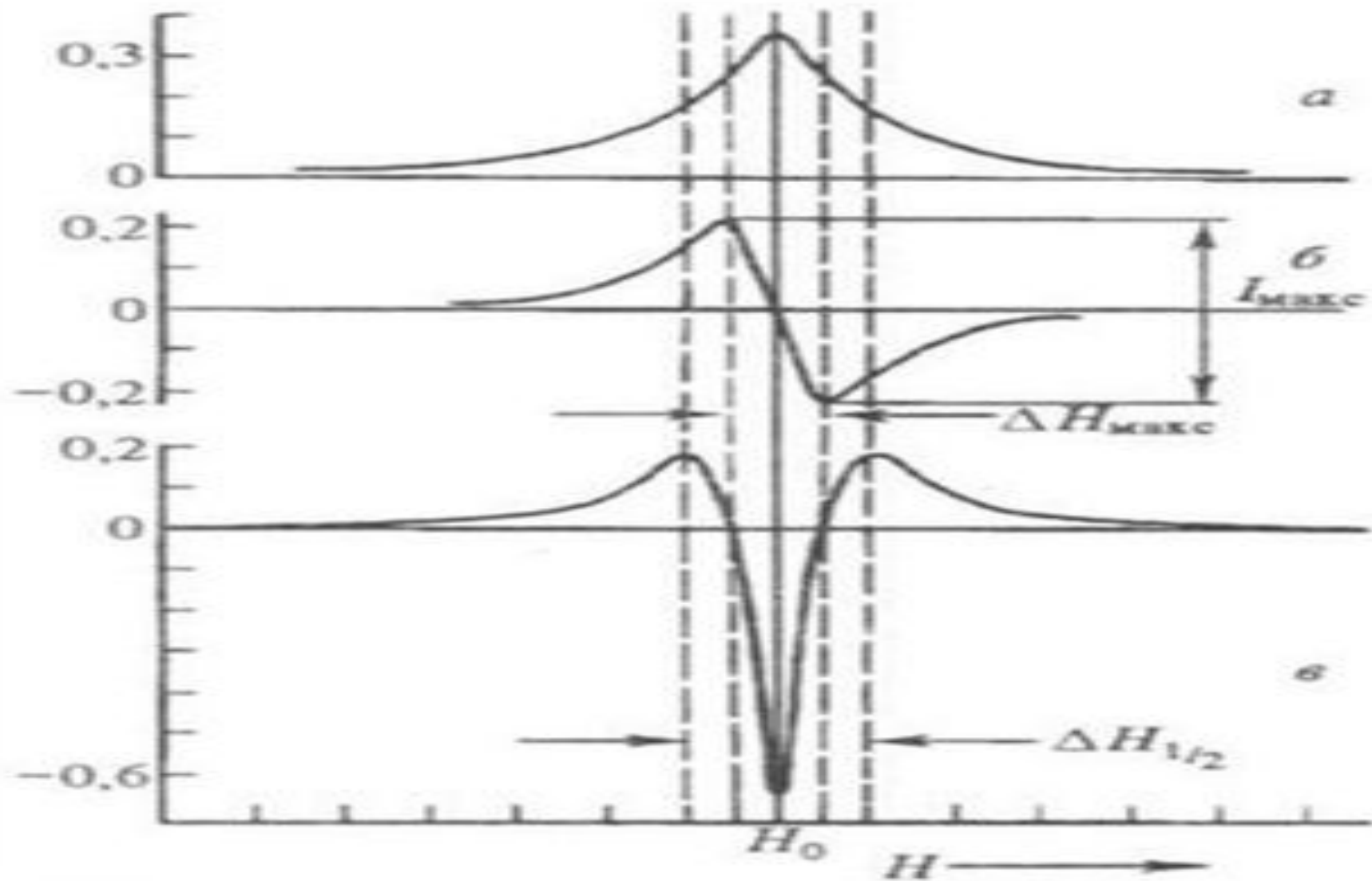
Электрондардың деңгейшелер бойынша таралуы Больцман заңына бағынады, ондағы деңгейшелердің толықтырылуы келесі өрнек арқылы анықталады:

$$\frac{n_1}{n_2} = \exp \frac{-\Delta E}{kT}$$

Егер үлгі жиілігі ν айнымалы магниттік өрістің әсеріне ұшыраса:

$$E_1 - E_2 = \Delta E = g\beta H$$

резонанс пайда болады. осы кезде көршілес деңгейшелер арасындағы ауысулар индукцияланады, бұл жағдайда кванттын $h\nu$ сіңірілуі мен шығарылу мүмкіндігі тең болады. Көбіне айнымалы өрістің (оның магниттік құраушысының) энергияны резонанстық сіңіруі басымырақ өтеді, өйткені Больцманның таралуына сәйкес (0,2%) төменгі деңгейдегі электрондар саны артық.



а- ЭПР жұту қисығы
 б- жұтылудың бірінші туындысы
 в- жұтылудың екінші туындысы
 $\Delta H_{\frac{1}{2}}$ - жұту қисығының жартылай
 биіктігіндегі сызық қалыңдығы

ЭПР спектрінің негізгі параметрлері интенсивтік, резонанстық сызықтың пішіні мен ені, g-фактор, жұқа және асқын жұқа құрылым болып саналады. Іс жүзінде сіңіру қисығынын бірінші туындысы - жиі, ал екіншісі сиректеу тіркеледі. Бұл қисықтар алынатын мәліметті айқындап, сезімталдылықты арттыруға мүмкіндік береді. Әрбір электрондық спин өзінің аумағынан аспайтын, басқа электрондардың тұрған жерінде өрістің пайда болуына, H өрістің резонанстық мәнін реттеп, сызық өңінің кеңеюіне себепші болады. Ланденнің спектроскопиялық ыдырауы g-факторы мынаған тең:

$$g = 1 + \frac{I(I+1) + L(L+1) + S(S+1)}{2I(I+1)}$$

L, S, I - орбиталдық спиндік, қозғалыс мөлшерінің толық моментіне сәйкес кванттық сандар.

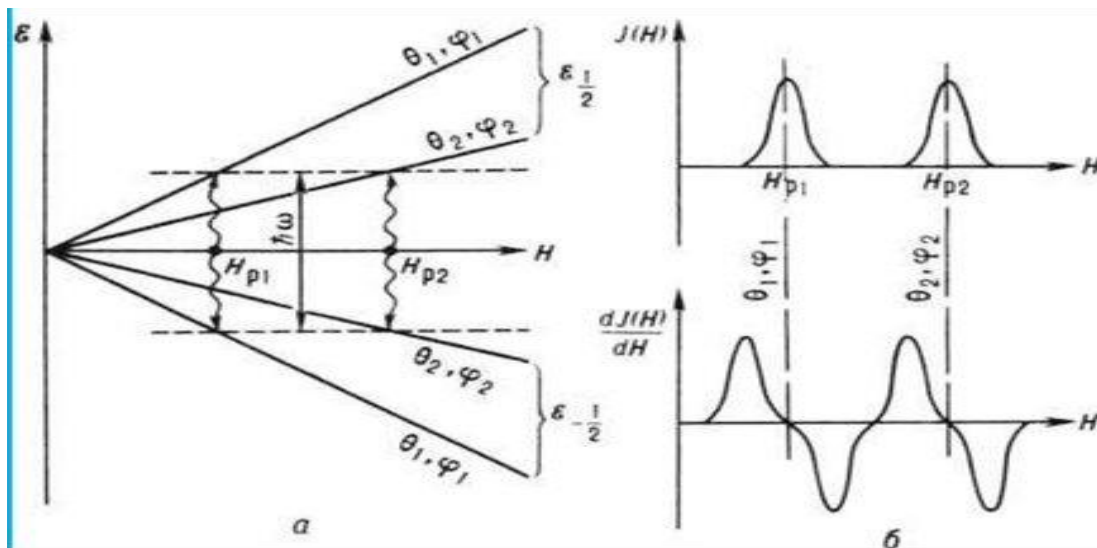
Жұқа құрылым

- * Құрамында бірден көп жұптасқан электроны ($S > I/2$) бар парамагниттік иондардың ЭПР спектрінде туындайды. Мысалы, $S = 3/2$ бар ионға тұрақты магнит өрісін бергенде $(2S + 1)$ деңгейше түзіледі, онда бос иондардың ара қашықтығы бірдей, квантты сіңіргенде бір резонанс байқалады. Иондық кристалда ондағы кристалдық өрістің бірдей болмауынан спиндік жүйедегі деңгейшелер аралықтары әр түрлі болады. Нәтижесінде электромагниттік сәуле шығаруды сіңіру өрістің әр түрлі мәнінде жүреді. Бұл ЭПР спектрінде үш резонанстық сызықтың пайда болады.

* **АСА ЖҰҚА ҚҰРЫЛЫМЫ.**

- * Аса жуқа қабаттың өзара әрекеттесуін екі типке бөледі: анизотропты ядро мен жұптаспаған электронның диноль-дипольдік әрекеттесуімен байланысты; изотропты ядро нүктесіндегі жұптаспаған электронның спиндік тығыздығы нөлге теңелгенде туындайды. Бірінші тектегі әрекеттесу ядро мен электронды қосатын сызыққа және магниттік өріс бағытының арасындағы бұрышқа тәуелді, онын шамасы:

$$\alpha = \mu \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{r}$$



Зертханалық жұмыс 9

Жұмыстың мақсаты: ИҚ- спектроскопия әдісінің теориялық негіздерін ұғыну, спектрлер бойынша атом топтары мен функционалдық топтарды анықтау.

Қолданылатын құралдар: ИҚ-спектрометр, спектрлер, анықтамалық кестелер.

Үлгілерді дайындау. Қатты заттар. Қатты заттарды дайындау әдістері:

- ❖ Суспензиялау кезінде зерттелетін затты бөлшектердің өлшемі 5 мкм кіші емес ұнтақтарға ұнтақтап, суспензия дайындайды. Мұндай тәсілмен алынған спектрлердің ерітінділер спектрлеріне қарағанда төмен болады.
- ❖ Престеуде тасымалдағыш ретінде KBr қолданылады, себебі ол барлық ИҚ-облыста мөлдір. Оны ұнтақтап, ұнтақталған үлгімен жақсылап араластырады.
- ❖ Еріткіштерде ерітіндінің спектрін пластиналар арасында жинақталып кюветаларда жазады немесе еріткішті буландырып, заттың пластинадағы қабықшасын алуға болады. Бұл кезде қолданылатын еріткіш құрғақ, еріген зат инертті, спектрдің қажетті облысында түссіз және зерттелетін қосылысты толық ерітетіндей (массалық үлесі 1-5%) болу қажет. Сұйықтық спектрін түсіргенде оның бірнеше (2-5) тамшысын екі кювета терезелерінің арасына тамызып, оларды қысады.
- ❖ Газ тәрізді заттардың спектрін газды кюветаларда түсіреді.

**Назарларыңызға
рақмет!!!**