

<b>anizokrón</b> <b>anisochronous</b>	lásd: <b>enantiotóp, diasztereotóp</b>
<b>árnyékolási állandó</b> <b>shielding constant</b>	<p>A <math>B_0</math> külső mágneses mező megzavarja (perturbálja) az elektronok mozgását a mag körül. Ez az indukált mozgás – hasonlóan egy tekercsben folyó elektromos áramhoz – egy kicsiny <math>B'</math> mágneses momentumot hoz létre a <math>B_0</math>-lal ellentétes irányban. A magot tehát a körülvevő elektronok <i>leárnyékolják</i> a külső mágneses mező hatásától. <math>B'</math> arányos <math>B_0</math>-lal, a mag helyén uralkodó mágneses mező nagysága (<math>B_{lok}</math>) tehát a következő lesz:</p> $B_{lok} = B_0 - B' = B_0 - \sigma B_0 = B_0(1 - \sigma)$ <p>ahol a <math>B'</math>-t és <math>B_0</math>-t összekapcsoló <math>\sigma</math> arányossági tényezőt <i>árnyékolási állandónak</i> nevezzük.</p>
<b>árnyékolási járulékok és empirikus értelmezésük</b> <b>shielding contributions</b>	<p>Az árnyékolási járulékok / kémiai eltolódások elméleti számítása hatalmas feladat. A gyakorlatban általában elegendő a kémiai eltolódások nagyságának empirikus szerkezeti összefüggések szintjén történő értelmezése. Célszerű a <math>\sigma</math> mag-árnyékolási állandót önkényesen négy összetevőre bontani:</p> $\sigma = \text{lokális diamágneses árnyékolás}$ <p style="margin-left: 40px;">+ lokális paramágneses árnyékolás  + távolabbi áramok okozta árnyékolás</p> <p>(pl. diamágneses szuszceptibilitási anizotrópia, <math>\sigma_{ani}</math>)  + egyéb árnyékolási források</p> <p>(pl. H-kötés, oldószerhatás, intramolekuláris elektromos erőterek, stb.)</p>
<b>diamágneses és paramágneses árnyékolás</b> <b>diamagnetic and paramagnetic shielding</b>	<p>A mágneses mező a molekulákban kétfajta elektromos áramot indukálhat: <i>diamágneses</i>et és <i>paramágneses</i>et. A diamágneses és paramágneses áramok ellentétes irányúak, és a mag <i>pozitív</i> ill. <i>negatív árnyékolását</i> eredményezik. Az árnyékolási állandó ezért diamágneses és paramágneses járulékok összegeként írható fel:</p> $\sigma = \sigma_d + \sigma_p$ <p>ahol <math>\sigma_d</math> pozitív és <math>\sigma_p</math> negatív.</p> <p><i>A diamágneses áramok</i> az elektronok atomi-, vagy molekuláris pályákon <i>belüli</i> mozgásából származnak. Az ily módon indukált áram egy csekély lokális teret hoz létre a <math>B_0</math>-lal ellentétes irányban, így <i>csökkenti</i> a külső mezőt és <i>pozitívan</i> árnyékolja az elektroneloszlás középpontjában levő atommagot. A diamágneses áram nagysága egyedül az atom vagy molekula elektron-hullámfüggvényének <i>alapállapotától</i> függ.</p> <p><i>A paramágneses áramokat</i> a külső mágneses mező oly módon indukálja, hogy az alapállapot hullámfüggvényét kis mértékben keveri a <i>gerjesztett állapot</i> hullámfüggvényével. Ez az indukált áram olyan mágneses mezőt kelt, amely <i>növeli</i> a külső mezőt és <i>negatívan</i> árnyékolja az elektroneloszlás középpontjában levő atommagot. <math>\sigma_p</math> és a <math>\Delta E</math> átlagos gerjesztési energia között fordított arányosság áll fenn. <math>\sigma_p</math> ugyancsak fordított arányban függ még a mag és a környező elektronok közötti</p>

	átlagos $R$ távolság köbétől.
<b>diasztereotóp magok</b> <b>diasztereotopic nuclei</b>	Azok az atommagok, amelyeket a hordozó molekulán végzett <i>bármilyen szimmetriaművelet</i> sem cserél fel. A diasztereotóp magok minden esetben <i>anizokrónok</i> , ( <i>kémiailag nem egyenértékűek / nonekvivalensek</i> ), azaz kémiai eltolódásuk különbözik.
<b>enantiotóp magok</b> <b>enantiotopic nuclei</b>	Azok az atommagok, amelyeket a hordozó molekulán végzett <i>forgatásos szimmetriaművelet</i> ( $S_n$ ) cserél fel. A homotóp magok <i>akirális</i> környezetben (pl. oldószer) <i>izokrónok</i> , ( <i>kémiailag egyenértékűek / ekvivalensek</i> ), királis környezetben pedig <i>anizokrónok</i> , ( <i>kémiailag nem egyenértékűek / nonekvivalensek</i> ), azaz kémiai eltolódásuk különbözik.
<b>gyenge csatolás</b> <b>weak coupling</b>	Ha egy spinrendszer két ( $i,j$ ) magjára teljesül az alábbi két feltétel, 1) mágneses egyenértékűség 2) $\Delta\nu_{i,j} \geq 10J_{i,j}$ , ahol $\Delta\nu_{i,j}$ a két mag rezonanciafrekvencia-különbsége, akkor az $i,j$ magokra a rendszer gyengén csatolt.
<b>homo-, heteronukleáris csatolás</b> <b>homo- and heteronuclear coupling</b>	Azonos, ill. különböző giromágneses hányadosú magok között fennálló spin-spin csatolás (pl. $J_{1H,1H}$ , $J_{13C,13C}$ : <i>homo-</i> , $J_{1H,13C}$ : <i>hetero-</i> ).
<b>homotóp magok</b> <b>homotopic nuclei</b>	Azok az atommagok, amelyeket a hordozó molekula <i>szimmetriatengelye</i> körüli forgatás ( $C_n$ ) cserél fel. A homotóp magok minden esetben <i>izokrónok</i> , más néven <i>kémiailag egyenértékűek (ekvivalensek)</i> azaz kémiai eltolódásuk azonos.
<b>iránykvantálás</b> <b>space quantization</b>	A magspin iránya is kvantált. Egy $l$ -spinű mag $l$ impulzusmomentumának egy tetszőlegesen választott (pl. a $z$ -) tengelyre nézve $2l+1$ számú merőleges vetülete van. Azaz $l$ $z$ -komponense, $I_z$ , kvantált: $I_z = m \cdot \hbar$ ahol $m$ , a mágneses kvantumszám, $2l+1$ számú lépésben egész-szám értékekkel változik $+l$ és $-l$ között: $m = l, l-1, l-2, \dots, -l+1, -l.$ (P.J. Hore: Mágneses magrezonancia. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.)
<b>izokrón</b> <b>isochronous</b>	lásd: <b>homotóp, enantiotóp</b>
<b>J-csatolás</b> <b>J-coupling</b>	lásd: <b>magspin-magspin ~</b>
<b>kémiai egyenértékűség</b> <b>chemical equivalence</b>	lásd: <b>homotóp, enantiotóp, diasztereotóp</b>
<b>kémiai eltolódás</b>	A mag-árnyékolás következtében a rezonanciafeltétel így alakul:

<p><b>chemical shift</b></p>	$\nu = \gamma B_0(1 - \sigma)/2\pi,$ <p>vagyis az atomban kötött mag rezonanciafrekvenciája <i>eltolódik</i> az elektronjaitól megfosztott csupasz magéhoz képest. Hasonló hatásnak vannak kitéve a molekulákban levő magok azzal a különbséggel, hogy az elektronok mozgása sokkal bonyolultabb, mint atomokban, és az indukált tér a külső teret <i>csökkentheti</i> vagy <i>növelheti</i> is. Mindazonáltal a hatást egyöntetűen kémiai eltolódásnak nevezzük. Az árnyékolási állandó nagyságát és előjelét a molekula elektronszerkezete határozza meg a mag közelében. A mag rezonanciafrekvenciája ezért jellemző annak környezetére.</p> <p>A <math>\sigma</math> árnyékolási állandót nem célszerű a kémiai eltolódás mértékének választani. Mivel abszolút eltolódásokra ritkán van szükség, és nehéz őket meghatározni, a gyakorlatban a kémiai eltolódást a vizsgált-, és egy viszonyítási alaphoz tekintett mag rezonanciafrekvenciáinak (<math>\nu</math>, ill. <math>\nu_{\text{ref}}</math>) <i>különbségeként</i> definiálják, a <math>\delta</math> dimenzió-nélküli paraméter segítségével:</p> $\delta = 10^6(\nu - \nu_{\text{ref}}) / \nu_{\text{ref}}$ <p>A <math>\nu - \nu_{\text{ref}}</math> frekvenciakülönbséget <math>\nu_{\text{ref}}</math>-val osztva, <math>\delta</math> olyan molekuláris mennyiségként jelenik meg, amely független a mérésre alkalmazott mágneses mező erősségétől. A <math>10^6</math> szorzótényező csupán a <math>\delta</math> számszerű értékének kényelmi okból történő skálázására szolgál: <math>\delta</math> értékét <i>milliomodrész</i>, vagy <i>ppm</i> egységekben mérjük. A viszonyítási (referencia) frekvenciát célszerűen egy alkalmas vegyület szolgáltatja, amelyet kis mennyiségben hozzáadunk a mérendő NMR mintához. <math>^1\text{H}</math>- és <math>^{13}\text{C}</math>-spektrumok esetében ez általában a tetrametil-szilán <math>[(\text{CH}_3)_4\text{Si}]</math> vagy röviden: TMS.</p>
<p><b>mag mágneses momentum</b> <b>nuclear magnetic moment</b></p>	<p>Szorosan kapcsolódik a mag spin-impulzusmomentumához. A mag <math>\mu</math> mágneses momentuma (szintén vektormennyiség) egyenesen arányos <math>I</math>-vel, a <math>\gamma</math> arányossági tényezőt giromágneses hányadosnak nevezzük:</p> $\mu = \gamma I.$ <p>(P.J. Hore: Mágneses magrezonancia. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.)</p>
<p><b>mag-Zeeman kölcsönhatás</b> <b>nuclear Zeeman effect</b></p>	<p>Mágneses mező távollétében egy <math>I</math>-spinű mag összes <math>2I + 1</math> orientációja azonos energiájú. Ez az elfajultság megszűnik mágneses mező jelenlétében: a <math>\mu</math> mágneses momentum energiája <math>B</math> mágneses mezőben (ismét egy vektor) a két vektor negatív skaláris szorzata:</p> $E = - \mu \cdot B$ <p>Erős mágneses mező jelenlétében a <math>z</math> kvantálási tengely már nem tetszőleges, hanem megegyezik a mágneses mező irányával. Ezért:</p> $E = - \mu_z B,$ <p>Ahol <math>\mu_z</math> a <math>\mu</math> <math>z</math>-komponense (<math>\mu</math>-nek <math>B</math>-re vett vetülete) és <math>B</math> a mező erőssége (<math>=  B </math>).</p> <p>Mivel <math>\mu_z = \gamma I_z</math> és <math>I_z = m\hbar</math>:</p> $E = - m\hbar\gamma B.$ <p>(P.J. Hore: Mágneses magrezonancia. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.)</p>

<p><b>magspin</b> <b>nuclear spin</b></p>	<p>A mágneses magoknak saját impulzusmomentumuk van, a <i>spin</i>. A spin-impulzusmomentum vektormennyiség, jelölése: <math>I</math>, nagysága (<math> I </math>) <math>\hbar</math> (<math>=h/2\pi</math>) egységekben kvantált:</p> $ I  = \hbar [I(I + 1)]^{1/2},$ <p>ahol <math>I</math> az atommag <i>spinkvantumszáma</i>, mely a következő értékek valamelyike lehet:</p> $I = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ <p>(a vektorokat félkövér szedéssel jelöljük; <math>I</math> nem tévesztendő össze az <math>I</math> kvantumszámmal)</p> <p>(P.J. Hore: Mágneses magrezonancia. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.)</p>
<p><b>magspin-magspin csatolás</b> <b>nuclear spin-spin coupling</b></p>	<p>Mag-mágneses momentumok között működő kölcsönhatás, amelyet folyadékfázisban a kémiai kötések elektronjai közvetítenek. A jelenséget nevezik <i>skaláris csatolásnak</i>, vagy <i>J-csatolásnak</i> is. A csatolás eredményeképpen az NMR rezonanciajel több komponensre hasad fel, amelyek egymáshoz viszonyított intenzitása és vonaltávolsága jellemző. Az ily módon létrejött vonalegyüttest <i>multipliettnek</i> nevezzük. A multipliett vonalainak számát a <i>szingulett</i> (1), <i>dublett</i> (2), <i>triplett</i> (3), <i>kvadrublett</i>(<i>kvadruplett</i>) (4), stb. görög eredetű elnevezésekkel adjuk meg.</p>
<p><b>magspin-magspin csatolási állandó</b> <b>spin-spin coupling constant</b></p>	<p>A csatolás erősségével, pontosabban: a csatolási energiával arányos mennyiség. Jele: <math>J</math>, mértékegysége: <math>\text{Hz} (\text{s}^{-1})</math>. <math>J</math> értéke független az alkalmazott statikus mágneses térerősségtől (<math>B_0</math>). A jelölésben gyakran feltüntetjük a <i>csatolási út</i> hosszát (<math>n</math>) és a csatoló magokat.</p>
<p><b>mágneses egyenértékűség</b> <b>magnetic equivalence</b></p>	<p>Ha egy homotóp csoport (<math>A_n</math>) bármelyik magjára igaz, hogy egy másik homotóp csoport (<math>X_m</math>) mindegyik tagjával azonos erősségű spin-spin csatolásban van, azaz: <math>J_{A,X1} = J_{A,X2} = \dots J_{A,Xm}</math>, akkor az <math>A</math> magok <i>mágnesesen egyenértékűek / ekvivalensek</i>.</p>
<p><b>NMR kiválasztási szabály</b> <b>NMR selection rule</b></p>	<p><math>\Delta m = (+/-)1</math>, azaz átmenetek csak a szomszédos Zeeman-szintek között megengedettek.</p>
<p><b>NMR rezonanciafeltétel</b> <b>NMR resonance condition</b></p>	<p><math>B</math> erősségű külső mágneses mezőben egy <math>I</math>-spinű mag <math>2I + 1</math> számú állapotára a szomszédos állapotok közötti energiakülönbség azonos: <math>\hbar\gamma B</math>.</p> $\Delta E = h\nu, \text{ ezért, } \Delta E = h\nu = \hbar\gamma B,$ <p>vagy:</p> $\nu = \gamma B / 2\pi,$ <p>ahol <math>\nu</math> az elektromágneses sugárzás frekvenciája. Egy <math>I</math>-spinű mag összes <math>2I</math> számú megengedett átmenete azonos energiájú.</p> <p>(P.J. Hore: Mágneses magrezonancia. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004.)</p>
<p><b>skaláris csatolás</b></p>	<p>lásd: <b>magspin-magspin csatolás</b></p>

<b>scalar coupling</b>	
<b>spinrendszer</b> <b>spin system</b>	Az egymással spin-spin csatolásban álló magok halmaza, függetlenül azok giromágneses hányadosaitól (lásd még: homo-, heteronukleáris csatolás).
<b>spin-spin csatolás</b> <b>spin-spin coupling</b>	lásd: <b>magspin-magspin csatolás</b>
<b>spin-spin csatolási állandó</b> <b>spin-spin coupling constant</b>	lásd: <b>magspin-magspin csatolási állandó</b>