

A (t)
-45.47

B (dq)
-47.14

C (hept)
-48.73

Ядерно-магнитный резонанс ЯМР

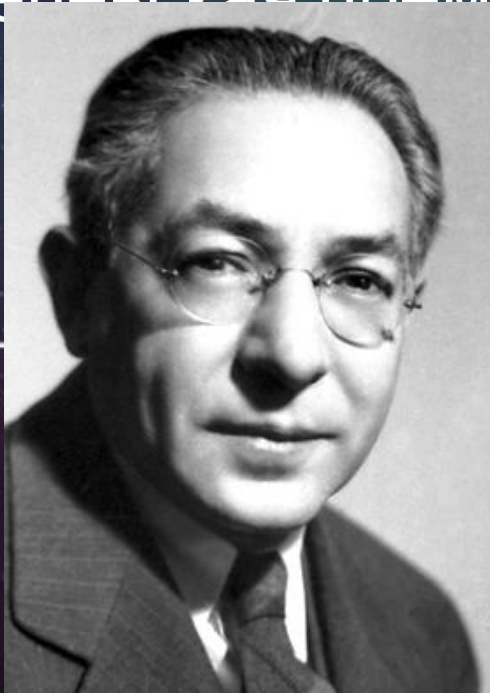
1.00

14.20

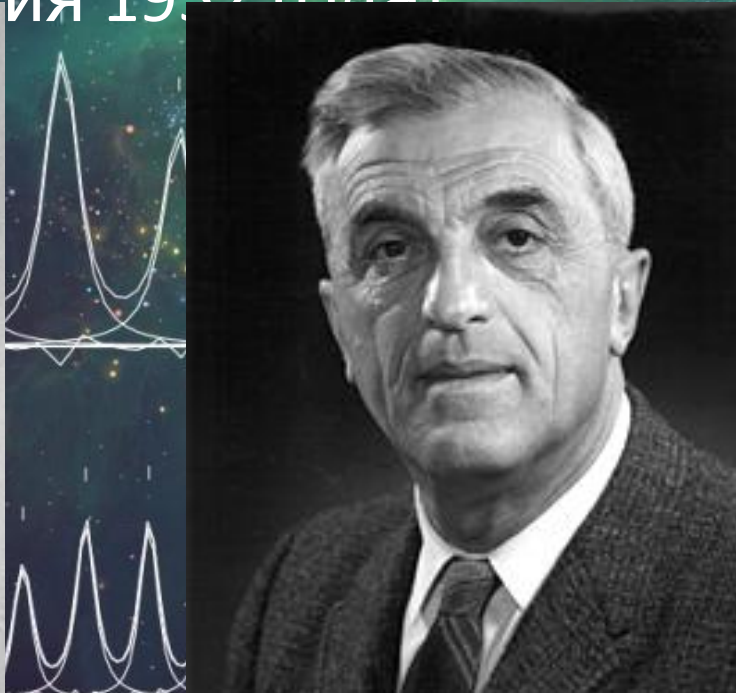
48.83

История

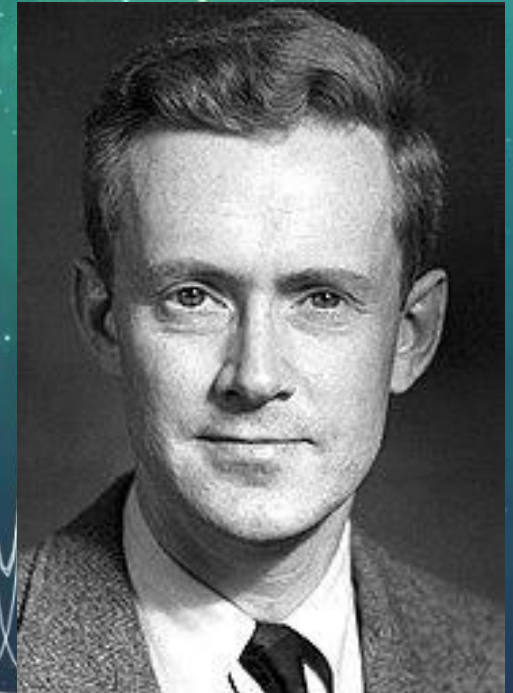
- Явление ядерного магнитного резонанса было открыто в 1938 году Исидором Раби в молекулярных пучках, за что он был удостоен Нобелевской премии 1944 года. В 1946 году Феликс Блох и Эдвард Миллз Парселл получили ядерный магнитный резонанс в жидкостях и твёрдых телах (Нобелевская премия 1952 года)



Исидором
Раби



Феликс
Блох



Эдвард Миллз
Парселл

B (dq)
-47.14

C (hept)
-48.73

14.20

48.83

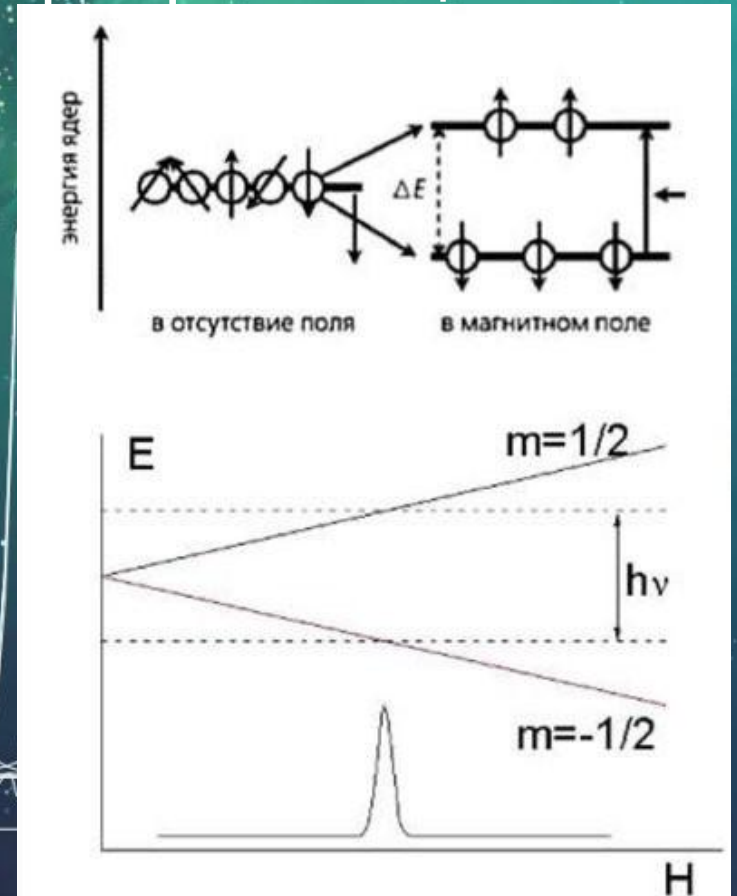
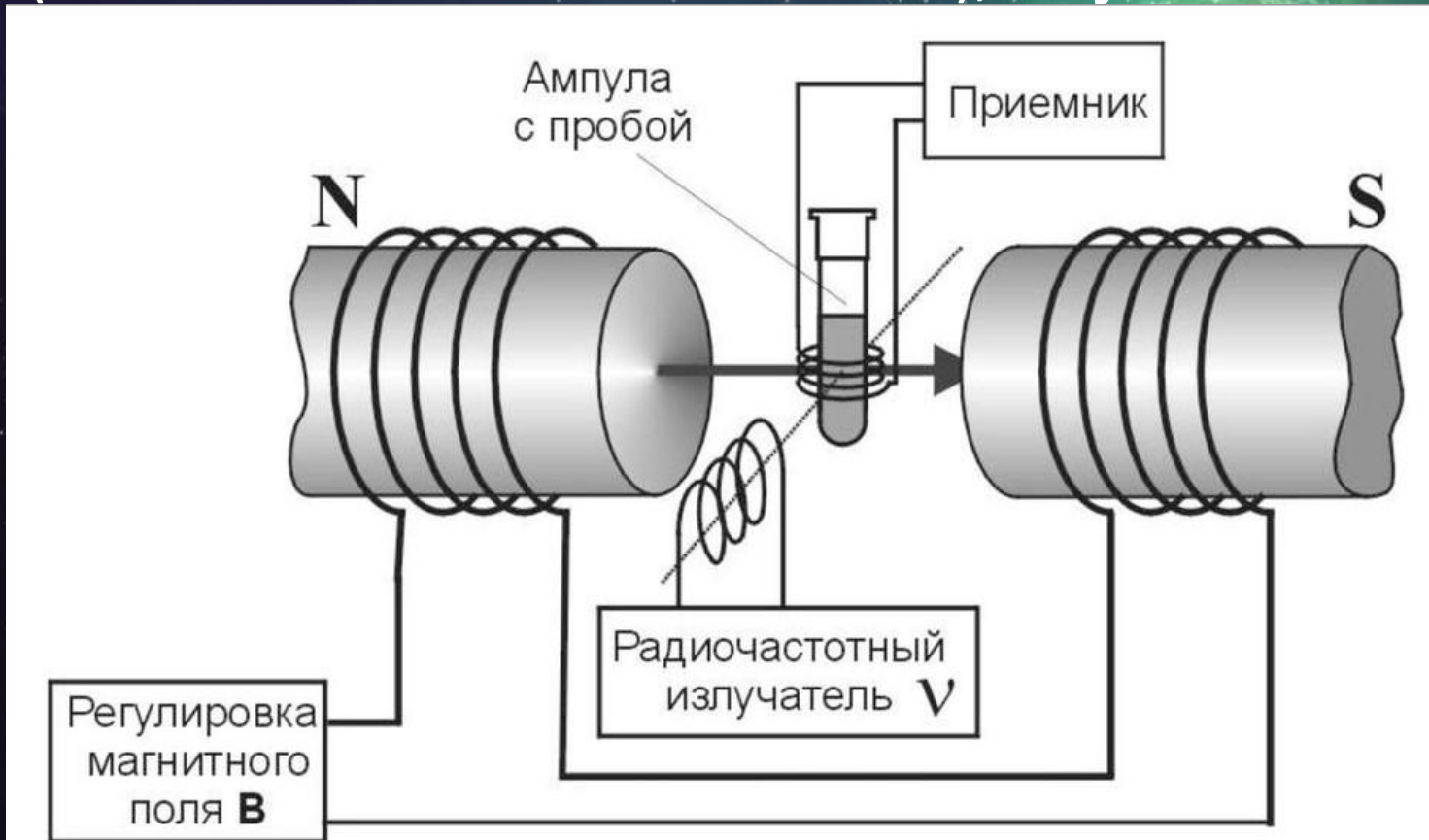
A (t)
-45.47

B (dq)
+7.14

C (hept)
-48.73

Что такое ЯМР?

- Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) — резонансное поглощение или излучение электромагнитной энергии веществом, содержащим ядра с ненулевым спином во внешнем магнитном поле, на частоте ν (называемой частотой ЯМР), обусловленное переориентацией



A (t)
-45.47

B (dq)
-47.14

C (hept)
-48.73

СПИН

- Для описания числа дискретных состояний спинового момента введено понятие спинового квантового числа I . Ядра с четным числом протонов и нейтронов имеют спиновое квантовое число (или просто спин) $I = 0$. Ядра с нечетными числами протонов и нейтронов обладают целочисленным спином. Ядра с числами протонов и нейтронов разной четности обладают полуцелыми спиновыми числами. В ядрах с $I \geq 1$ распределение зарядов отличается от сферического. Эта асимметрия описывается электрическим квадрупольным моментом, который взаимодействует с соседними зарядами и влияет на время релаксации.

1.00

14.20

48.83

A (t)
-45.47

B (dq)
-48.80

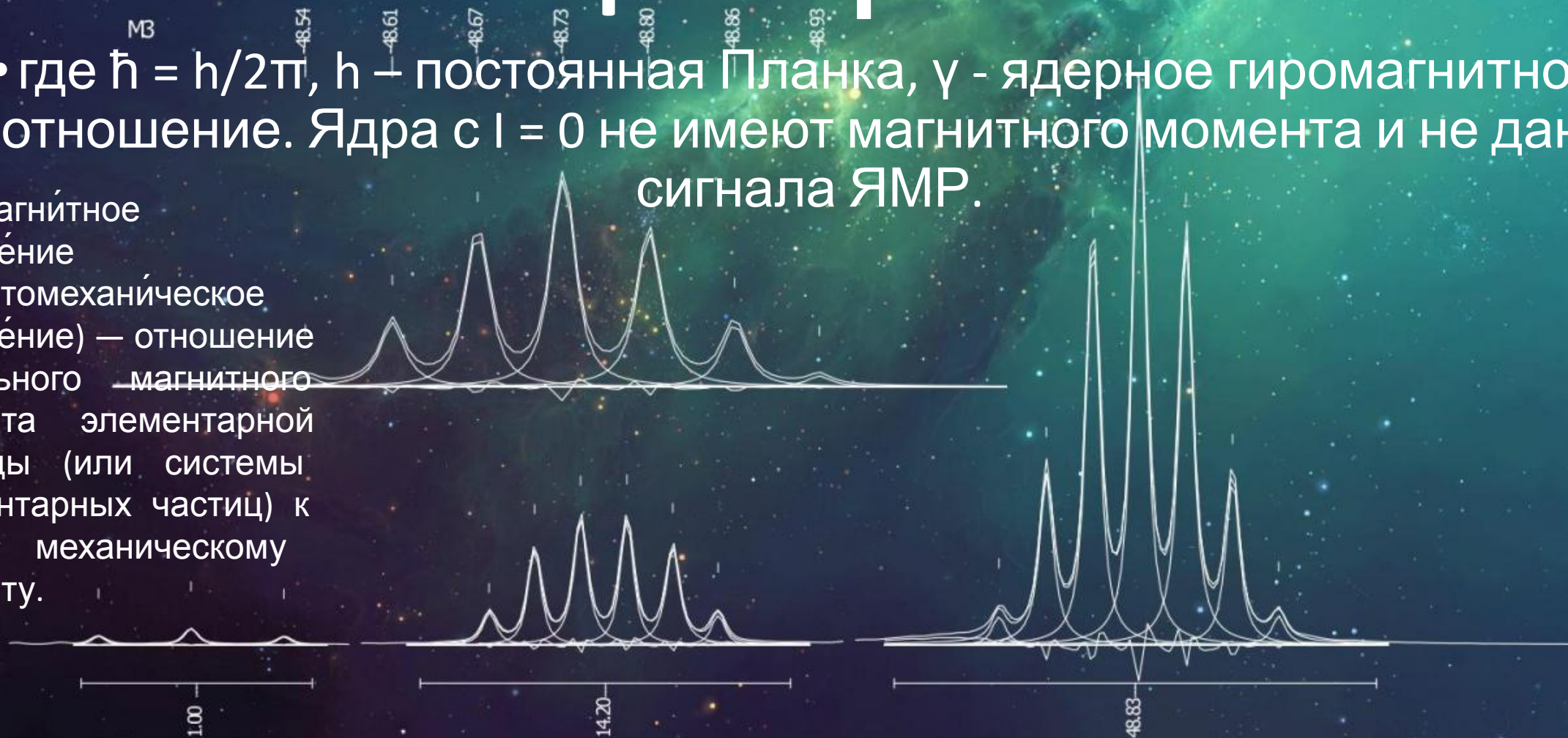
C (hept)
-48.83

Физический смысл

$$\bullet \mu = \gamma \hbar I$$

- где $\hbar = h/2\pi$, h – постоянная Планка, γ - ядерное гиромагнитное отношение. Ядра с $I = 0$ не имеют магнитного момента и не дают сигнала ЯМР.

Гиромагнитное отношение (магнитомеханическое отношение) — отношение дипольного магнитного момента элементарной частицы (или системы элементарных частиц) к её механическому моменту.



- Принципиальная особенность поведения квантового магнитного момента состоит в том, что частица может принимать только несколько разрешенных значений энергии. Эти уровни можно обнаружить при поглощении или выделении кванта излучения $h\nu$. Различие энергии двух ядерных спинов со спиновым числом $1/2$ во внешнем магнитном поле с магнитной индукцией B составляет $\gamma\hbar B$

Основное уравнение ЯМР, называемое условием резонанса:

$$h\nu = \Delta E = \gamma\hbar B$$

Как следствие, получаем уравнение, которое связывает частоту электромагнитного излучения ν (Гц) с индукцией магнитного поля

$$B \nu = \gamma B / 2\pi$$



A (t)
-45.47B (dq)
-47.14C (hept)
-48.73

1 Тл = 10 000 Гс.

Резонансная Частота

Спектроскопия ЯМР

Частоты измерений и соответствующие плотности магнитного потока в спектроскопии ЯМР ^1H и ^{13}C

B_0 , Тл	Частота измерения, МГц	
	^1H	^{13}C
1,41	60	15,1
1,88	80	20,1
2,11	90	22,63
2,35	100	25,15
4,70	200	50,3
5,87	250	62,9
7,05	300	75,4
9,40	400	100,6
11,74	500	125,7
14,09	600	150,9

22

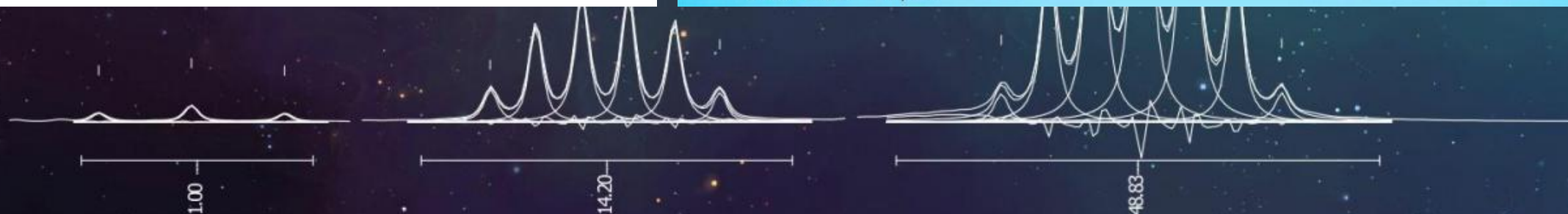
ХАРАКТЕРИСТИКИ ЯДЕР

Изотоп	Распространенность, %	Частота ЯМР в поле 10 кГс, МГц	Отн. чувствительность ¹	Магнитный момент ²	Спин ³
^1H	99.984	42.577	1.000	2.7972	$\frac{1}{2}$
$^2\text{H(D)}$	0.0156	6.536	0.0096	0.8574	1
^{10}B	18.83	4.575	0.0199	-1.1774	3
^{11}B	81.17	13.660	0.165	1.8006	$\frac{3}{2}$
^{13}C	1.108	10.705	0.0159	0.7022	$\frac{1}{2}$
^{14}N	99.635	3.076	0.0010	0.4036	1
^{15}N	0.365	4.315	0.0010	-0.2830	$\frac{1}{2}$
^{19}F	100	40.055	0.834	2.6273	$\frac{1}{2}$
^{31}P	100	17.235	0.0664	1.1305	$\frac{1}{2}$

¹ При равном числе ядер в постоянном поле H

² В единицах ядерного магнетона $eh/4\pi m_p c$ (теоретический магнитный момент протона)

³ В единицах $h/2\pi$



Химический сдвиг

Химический сдвиг в ЯМР — смещение сигнала ЯМР в зависимости от химического состава вещества, обусловленное экранированием внешнего магнитного поля электронами атомов.

A(t)
-45.47

B(Oct)
-47.14

C(hept)
-48.73

МВ

-48.54

-48.61

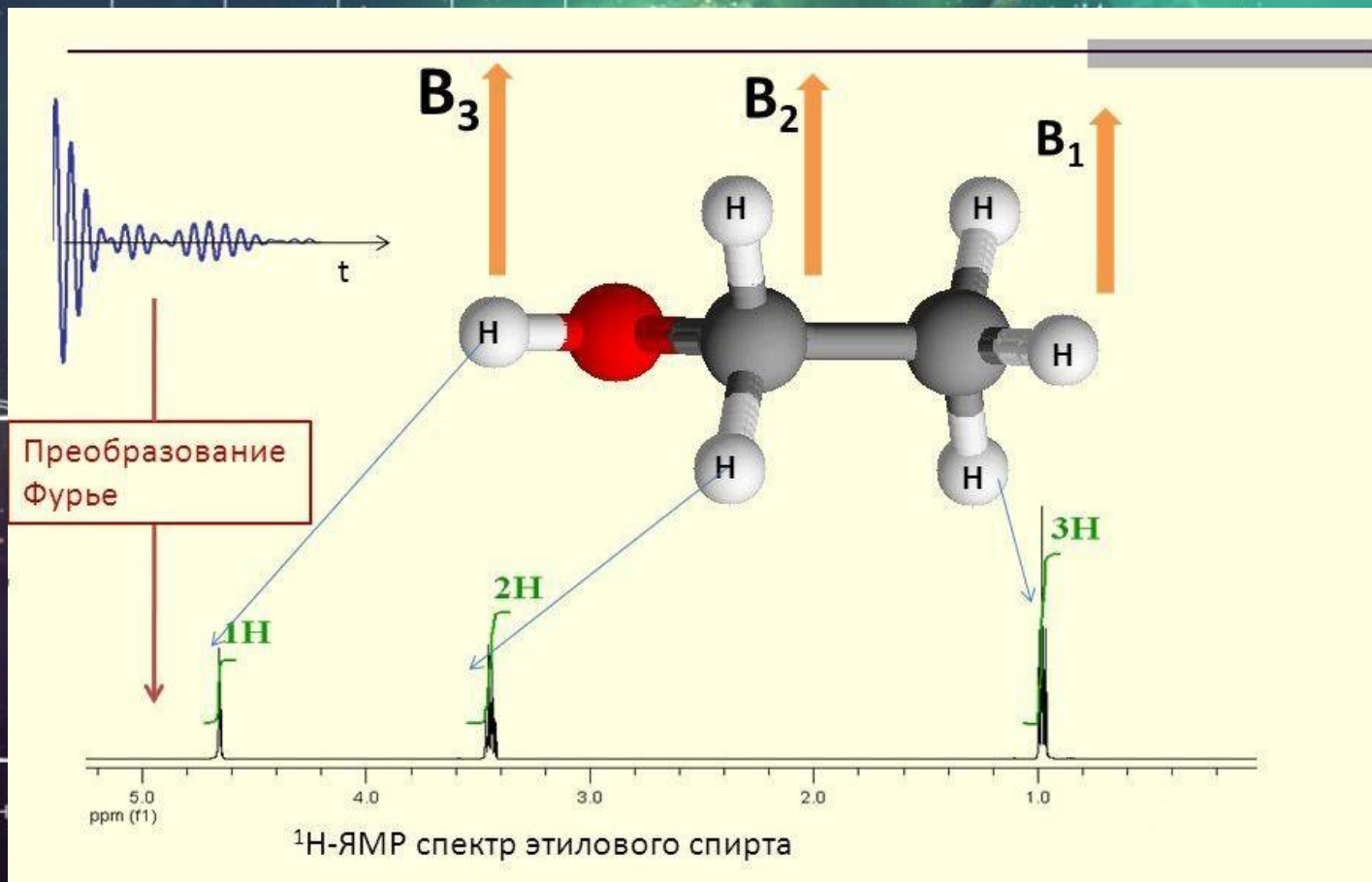
-48.67

-48.73

-48.80

-48.86

-48.93



1.00

A (t)
-45.47

B (dq)
7.14

C (hept)
-8.73

Разберем пример

