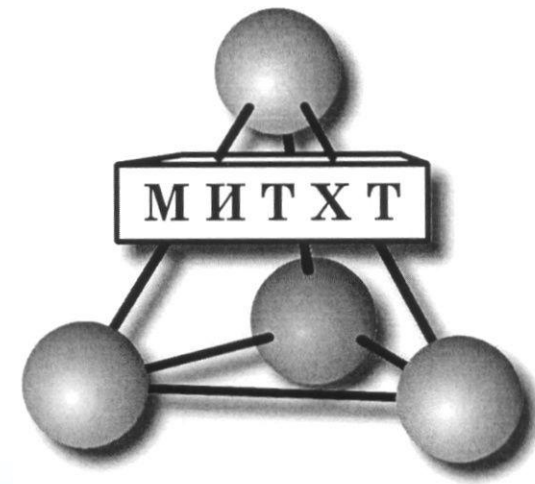




**КАФЕДРА ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ  
РЕДКИХ И РАССЕЯННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ,  
НАНОРАЗМЕРНЫХ И  
КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ  
ИМЕНИ К.А. БОЛЬШАКОВА**



Над проектом работали:

Роман Сапрыкин

Ali Mohammadi

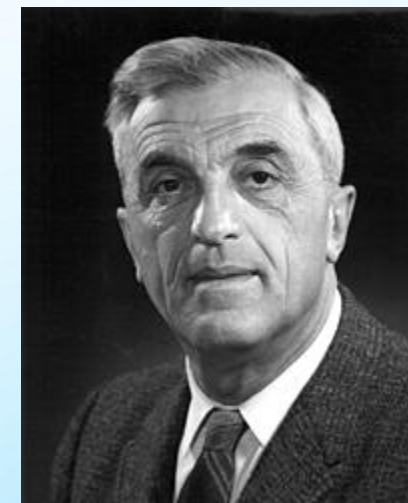
**Ядерный  
магнитный  
резонанс**

- ▶ Годом открытия ЯМР считается 1945-й, когда американцы Феликс Блох из Стэнфорда и независимо от него Эдвард Парселл и Роберт Паунд из Гарварда впервые наблюдали сигнал ЯМР на протонах.
- ▶ Важно отметить, что годом раньше в Советском Союзе, в Казани, Евгением Завойским было открыто явление ЭПР. Сейчас уже хорошо известно, что Завойский также наблюдал и сигнал ЯМР, это было перед войной, в 1941 году.

## ИСТОРИЯ ОТКРЫТИЯ



Е .К. Завойский



Феликс Блох

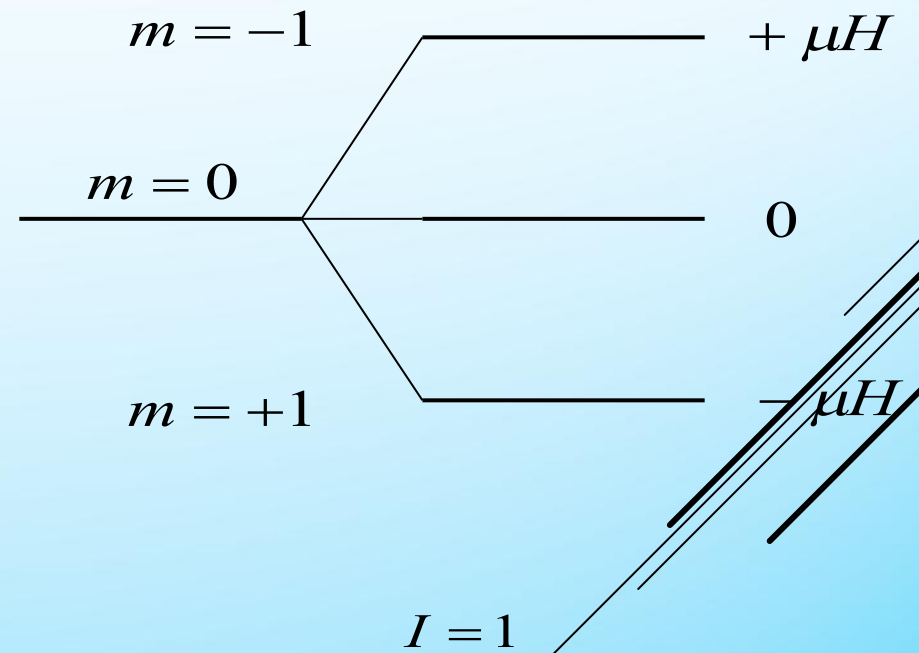
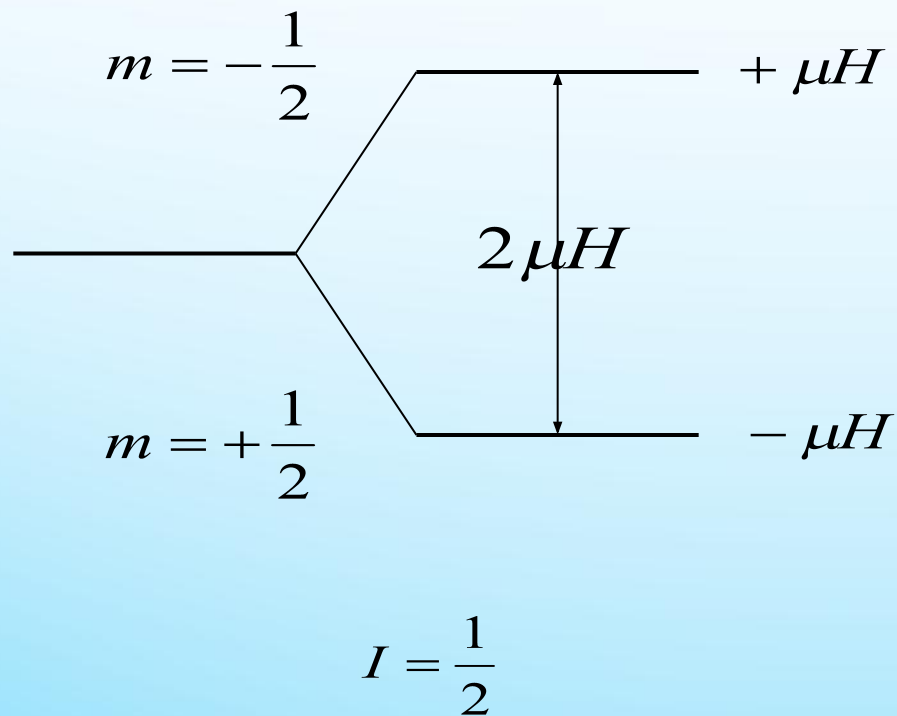
# ОСНОВЫ ЯМР

- ▶ у частиц есть **момент количества движения (спин)**
- ▶ если **спин отличен от нуля**, частица имеет ненулевой **магнитный момент**  $\mu$  (т.к. она заряжена), параллельный моменту количества движения
- ▶ **наложение внешнего магнитного поля  $H$**  вызывает **расщепление энергитического уровня** на величину

$$\Delta E = 2\mu H$$

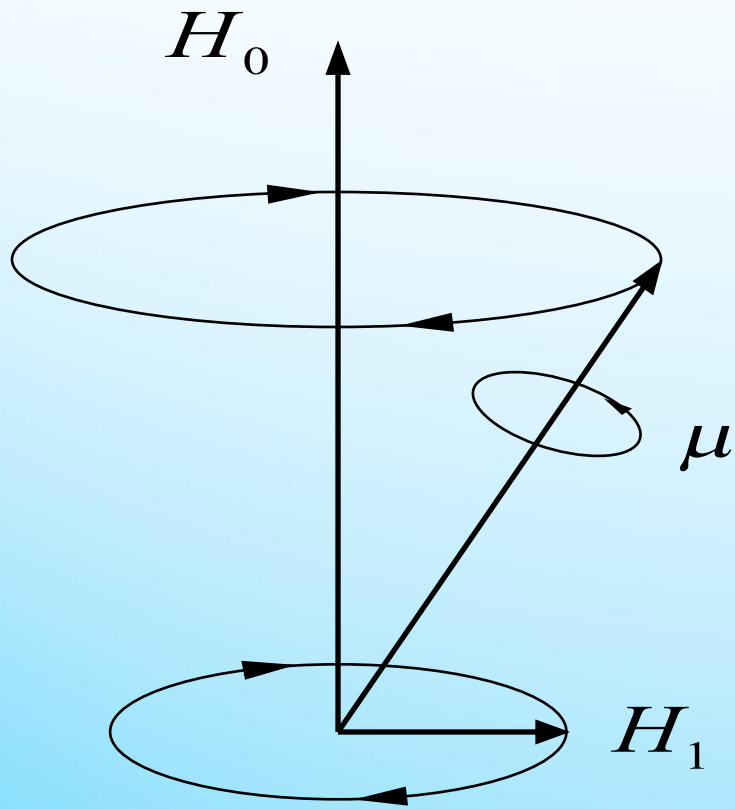
# РАСЩЕПЛЕНИЕ УРОВНЕЙ

H ↑



$I$  – спин,  $m$  – магнитное квантовое число (проекция магнитного момента)

# ЯВЛЕНИЕ ЯМР



- ▶ при увеличении поля  $H_0$  мы лишь увеличим скорость прецессии, но не сориентируем моменты
- ▶ приложим дополнительное поле  $H_1$  и начнём вращать его
- ▶ если частота вращения  $H_1$  близка к частоте вращения магнитного момента (ларморовой прецессии), оно вызовет нутацию (раскачивание) последнего
- ▶ как только частота вращения  $H_1$  становится равной частоте ларморовой прецессии наступает резонанс – угол между магнитным моментом и полем  $H_0$  будет заметно меняться

# ХАРАКТЕРИСТИКИ ЯДЕР

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

<sup>1</sup> При равном числе ядер в постоянном поле H

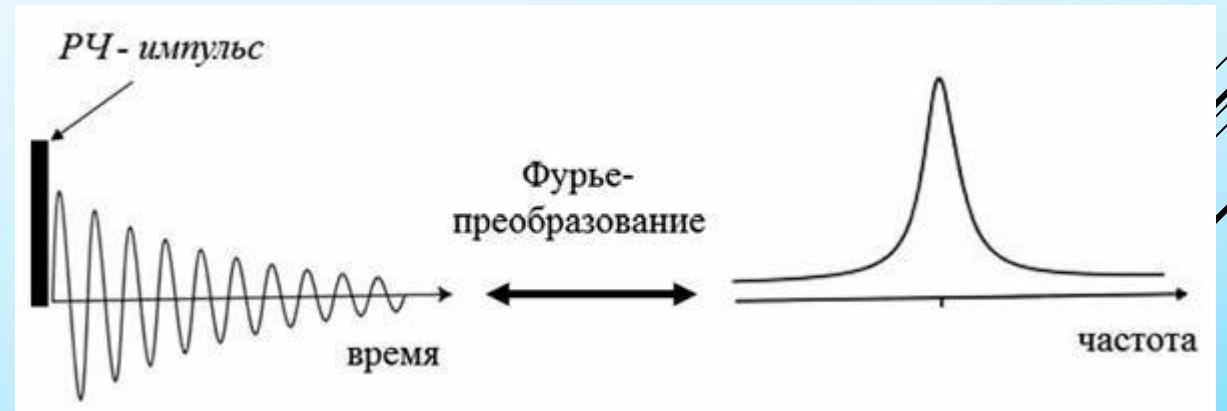
<sup>2</sup> В единицах ядерного магнетона

$e\hbar/4\pi M_n c$  (теоретический магнитный момент протона)

<sup>3</sup> В единицах  $\hbar/2\pi$

# ФУРЬЕ-СПЕКТРОСКОПИЯ

- ▶ Магнитные моменты ядер возбуждаются коротким мощным импульсом, после которого регистрируется сигнал, наводимый в РЧ-катушке свободно прецессирующими магнитными моментами
- ▶ Этот сигнал постепенно спадает к нулю по мере возвращения магнитных моментов в состояние равновесия (этот процесс называется магнитной релаксацией)
- ▶ Спектр ЯМР получается из этого сигнала с помощью Фурье-преобразования.



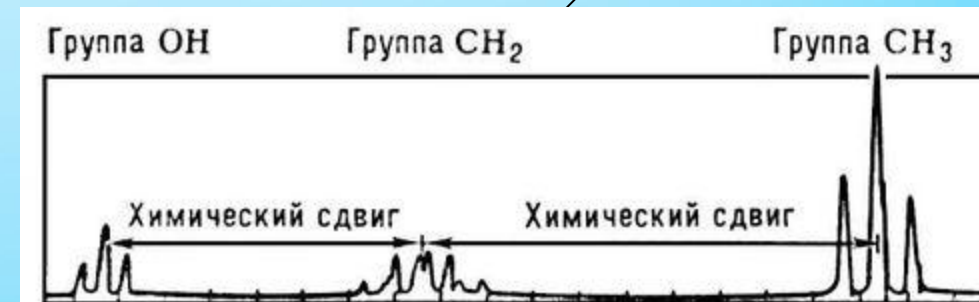
# МАГНИТНОЕ ЭКРАНИРОВАНИЕ ИЛИ ЧЕМ ИНТЕРЕСЕН ЯМР

В 1951 году Арнольд с сотрудниками<sup>[1]</sup> зарегистрировали спектр этилового спирта, в котором **различным химически неэквивалентным ядрам**, принадлежащим одной и той же молекуле, соответствовали **отдельные линии спектра**.

Причина различий резонансных напряженностей магнитного поля – электронные облака вокруг каждого ядра.

Теперь можно **идентифицировать химический состав** молекул: как входящие в них протоны, так и число протонов соответствующего типа.

Химический сдвиг - электронная оболочка молекулы откликается на внешнее магнитное поле и старается его экранировать



<sup>[1]</sup> J.T. Arnold, S.S. Dharmatti, M.E. Packard, J. Chem. Phys., **19**, 507 (1951)



# ПРЕИМУЩЕСТВА И НЕДОСТАТКИ ЯМР

## Преимущества

- ▶ Одно из основных достоинств ЯМР в том, что, с одной стороны, его природные зонды, т. е. магнитные ядра, распределены по всей молекуле, а с другой стороны, он позволяет отличить эти ядра друг от друга и получать пространственно-селективные данные о свойствах молекулы.
- ▶ Почти все остальные методы дают информацию либо усредненную по всей молекуле, либо только о какой-то одной ее части

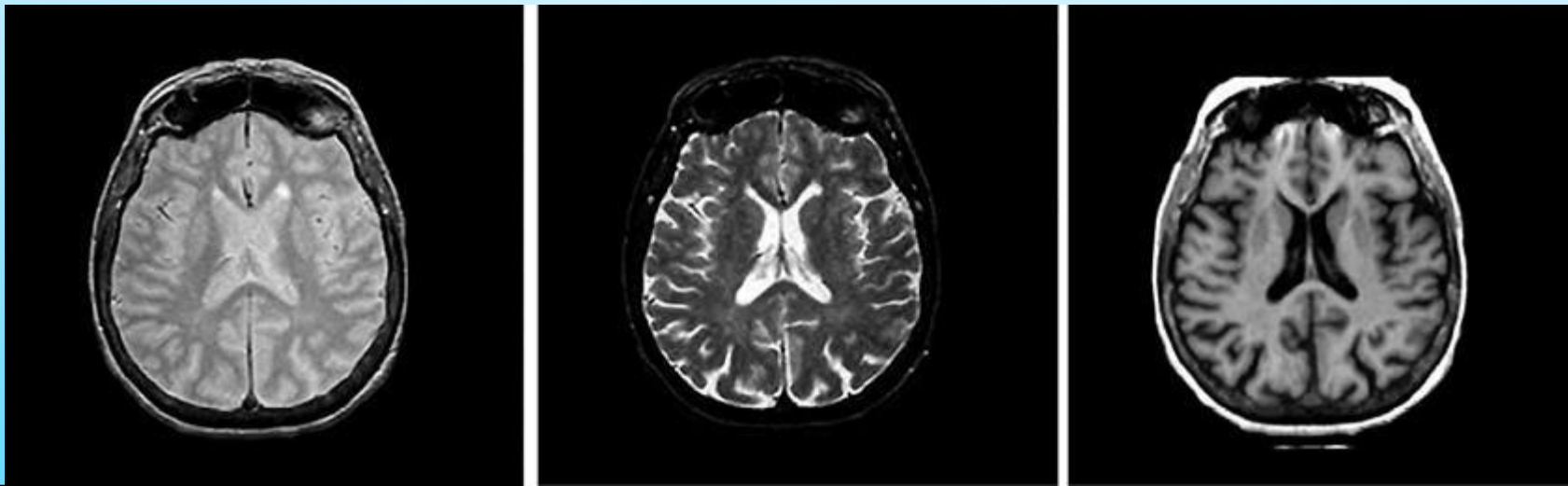
## Недостатки

- ▶ Во-первых, это низкая чувствительность по сравнению с большинством других экспериментальных методов (оптическая спектроскопия, флюоресценция, ЭПР и т. п.). Это приводит к тому, что для усреднения шумов сигнал нужно накапливать долгое время.
- ▶ Во-вторых, ЯМР-спектрометры — одни из самых дорогих научных приборов, их стоимость измеряется как минимум сотнями тысяч долларов, а самые дорогие спектрометры стоят несколько миллионов.

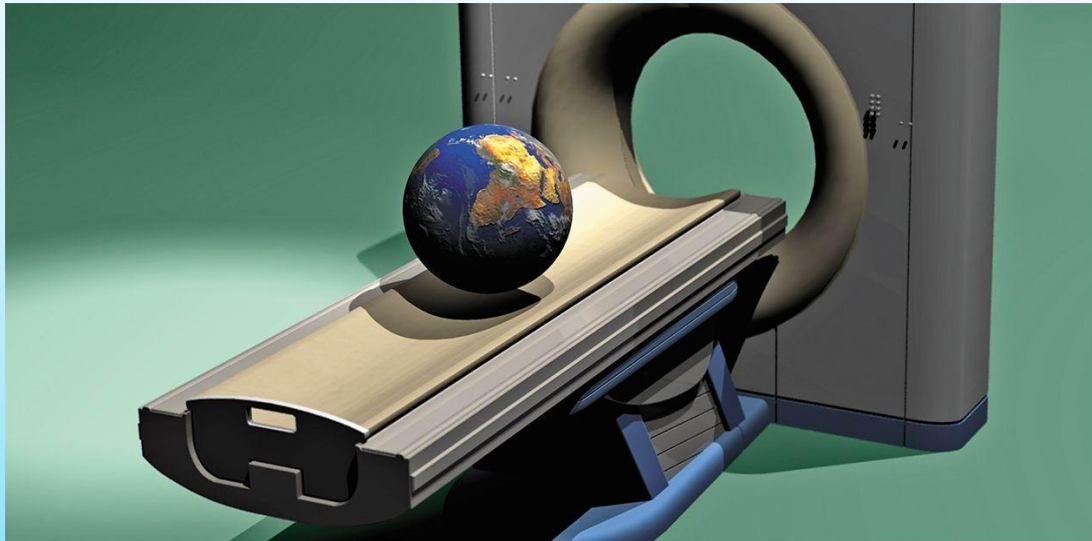


# ЯМР ТОМОГРАФИЯ

- ▶ В неоднородных магнитных полях, таких как человеческий организм, величина магнитного поля в разных частях “образца” будет разная, а это значит, что сигнал ЯМР можно наблюдать не от всего образца, как в обычном спектрометре, а только от его узкого слоя, для которого соблюдаются резонансные условия, т.е. нужное соотношение магнитного поля и частоты. Меняя это соотношение можно менять слой, который будет давать сигнал



# ПРИМЕНЕНИЕ ЯМР



- ▶ Можно сказать что ямр метод применяется для исследований различных структурно-динамических свойств веществ на молекулярном уровне
- ▶ Самое интересное и важное, с практической точки зрения, применение ЯМР-томографии нашлось в медицине

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

