

Základní principy NMR

Vlastnosti jader

<u>Jádro</u>	hmotnost	m	nukleonové (hmotové) číslo	A
	náboj	Q	protonové (atomové) číslo	Z
	magnetický moment	μ	spin	I

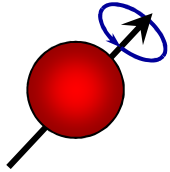
A	Z	I
sudé	sudé	nulový 0
sudé	liché	celočíselný 1, 2, 3, ...
liché		poločíselný 1/2, 3/2, 5/2, ...

${}^6_6\text{C}^{12}$	$I = 0$	${}^1_1\text{H}^2$	$I = 1$	${}^1_1\text{H}, {}^6_6\text{C}, {}^7_7\text{N}, {}^{15}_{15}\text{P}, {}^9_9\text{F}^{19}$	$I = 1/2$
${}^8_8\text{O}^{16}$		${}^5_5\text{B}^{10}$	$I = 3$	${}^5_5\text{B}, {}^7_3\text{Li}, {}^{11}_{11}\text{Na}^{23}$	$I = 3/2$
		${}^7_7\text{N}^{14}$	$I = 1$	${}^8_8\text{O}^{17}$	$I = 5/2$

Jádra a jejich spin

<u>H</u>				X $I = 1/2$				X $I = 1/2$									<u>He</u>
<u>Li</u>	<u>Be</u>			X $I > 1/2$								<u>B</u>	C	N	<u>O</u>	F	<u>Ne</u>
<u>Na</u>	<u>Mg</u>											<u>Al</u>	<u>Si</u>	P	<u>S</u>	<u>Cl</u>	<u>Ar</u>
<u>K</u>	<u>Ca</u>	<u>Sc</u>	<u>Ti</u>	<u>V</u>	<u>Cr</u>	<u>Mn</u>	Fe	<u>Co</u>	<u>Ni</u>	<u>Cu</u>	<u>Zn</u>	<u>Ga</u>	<u>Ge</u>	<u>As</u>	Se	<u>Br</u>	<u>Kr</u>
<u>Rb</u>	<u>Sr</u>	Y	<u>Zr</u>	<u>Nb</u>	<u>Mo</u>	<u>Tc</u>	<u>Ru</u>	Rh	<u>Pd</u>	Ag	Cd	<u>In</u>	<u>Sn</u>	<u>Sb</u>	Te	<u>I</u>	Xe
<u>Cs</u>	<u>Ba</u>	<u>La</u>	<u>Hf</u>	<u>Ta</u>	W	<u>Re</u>	Os	<u>Ir</u>	Pt	<u>Au</u>	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	<u>Ac</u>	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt									
		<u>Ce</u>	<u>Pr</u>	<u>Nd</u>	<u>Pm</u>	<u>Sm</u>	<u>Eu</u>	<u>Gd</u>	<u>Tb</u>	<u>Dy</u>	<u>Ho</u>	<u>Er</u>	<u>Tm</u>	Yb	<u>Lu</u>		
		<u>Th</u>	<u>Pa</u>	<u>U</u>	<u>Np</u>	<u>Pu</u>	<u>Am</u>	<u>Cm</u>	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Moment hybnosti a spin



Spin is a mysterious beast, and yet its practical effect prevails over the whole of science. The existence of spin, and the statistics associated with it, are the most subtle and ingenious design of Nature - without it the whole universe would collapse.

Sin-itiro Tomonaga, “*The Story of Spin*”
Nobelova cena za fyziku 1965.

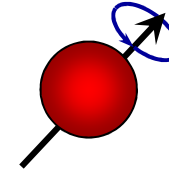
Gyroskop video: http://www.youtube.com/watch?v=cquvA_IpEsA

Jaderný spin a magnetický moment

$$\vec{I} = (I_x, I_y, I_z)$$

jaderný moment hybnosti

je jádru vlastní



velikost $|\vec{I}| = \hbar\sqrt{I(I+1)}$

spinové číslo

průmět do osy z $I_z = (-I)\hbar, (-I+1)\hbar, \dots, (I+1)\hbar, I\hbar$

2I + 1 hodnot

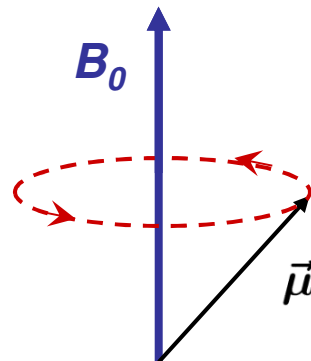
Magnetický moment

$$\vec{\mu} = \gamma\vec{I}$$

gyromagnetický poměr

Magnetický moment v magnetickém poli

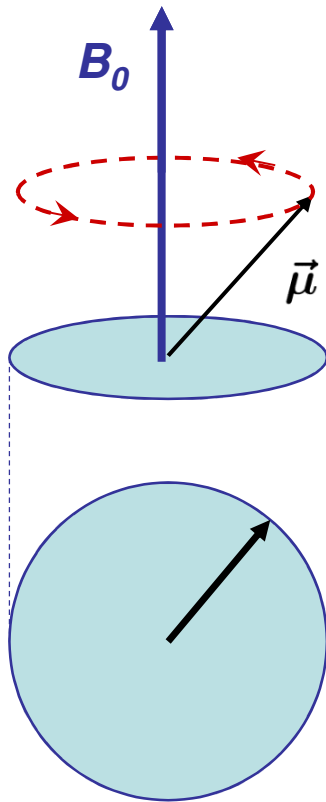
$$\vec{B} = (0, 0, B_0)$$



Larmorova precese

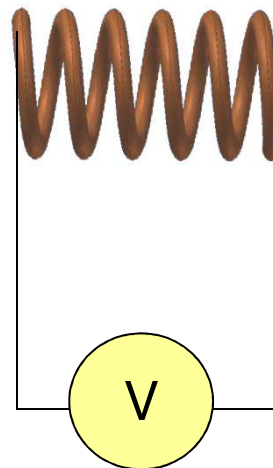
Larmorova precese

P. Callaghan video: <http://www.youtube.com/watch?v=7aRKAXD4dAg>



$$\nu = -\frac{\gamma}{2\pi} B_0$$

*NMR měří frekvenci
Larmorovy precese
pro různá jádra
(jejich mag. momenty)*



*Proměnný magnetický tok
indukuje signál v cívce*

Larmorova precese

Lars G. Hanson: Bloch Simulator

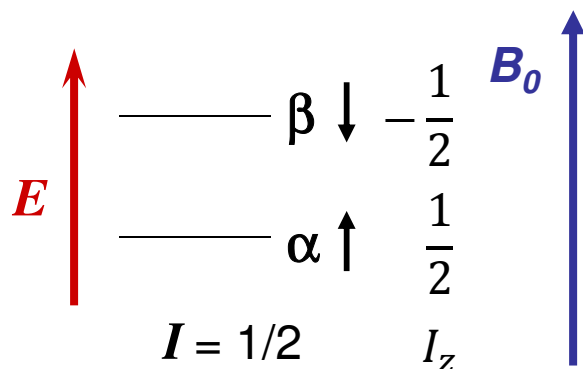
<http://www.drcmr.dk/bloch>

*Frekvence precese a velikost magnetického pole
Rotující soustava souřadná*

Soubor spinů

Energie magnetického momentu v magnetickém poli

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$



Boltzmanovo rozdělení

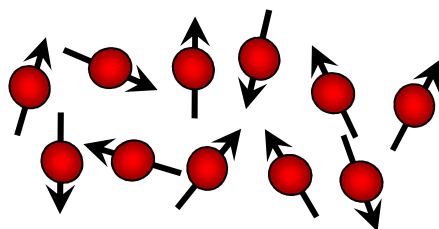
$$\Delta E = \hbar \gamma B_0$$

$$\frac{N_\alpha}{N_\beta} = \exp \left\{ \frac{\Delta E}{k_b T} \right\}$$

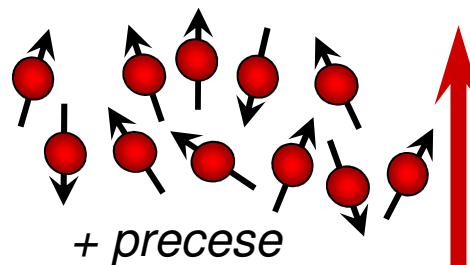
Pro ^1H při teplotě 300K v magnetickém poli 9.4 T

$$\frac{N_\alpha}{N_\beta} = 1.000064$$

$B_0 = 0$



B_0



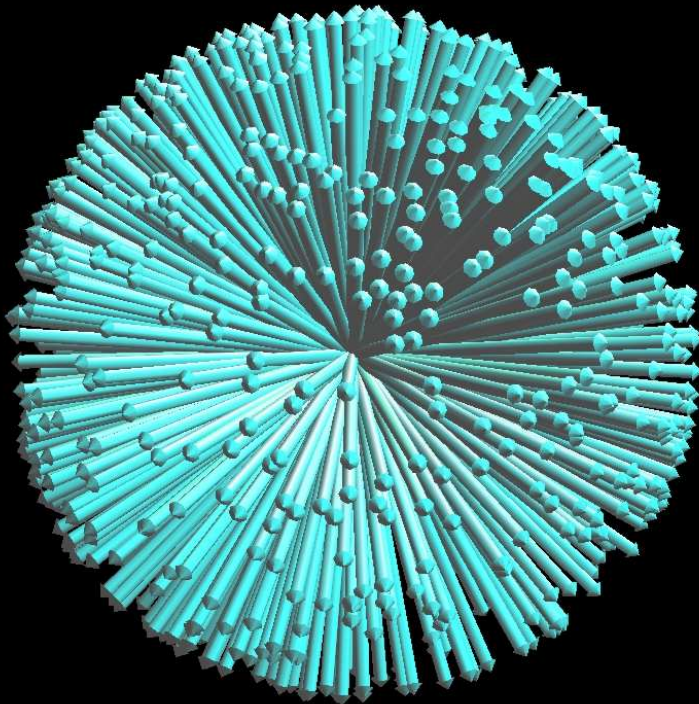
+ precese

Magnetizace
součet magnetických momentů

lehká preference v orientacích

Soubor spinů

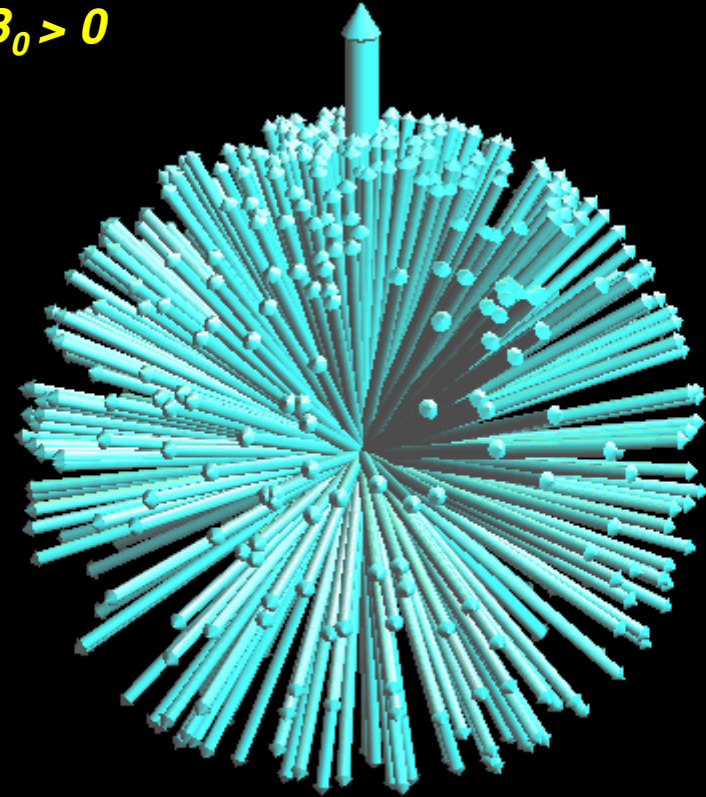
$B_0 = 0$



$$\vec{M} = 0$$

náhodné orientace

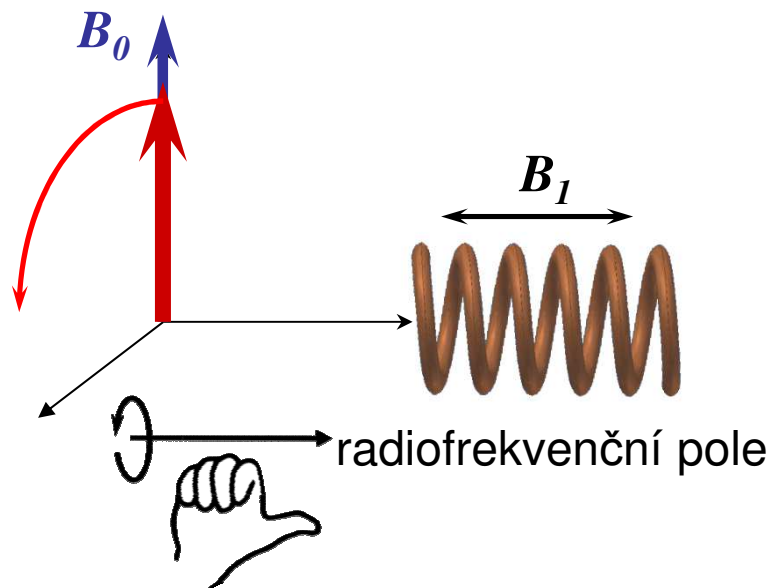
$B_0 > 0$



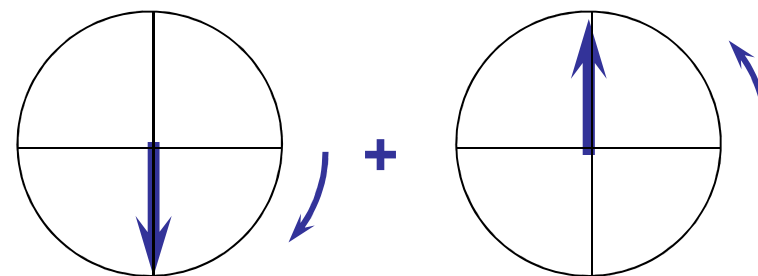
$$\vec{M} = (0, 0, M_0)$$

precese a polarizace
náhodná počáteční fáze

Pulsní NMR



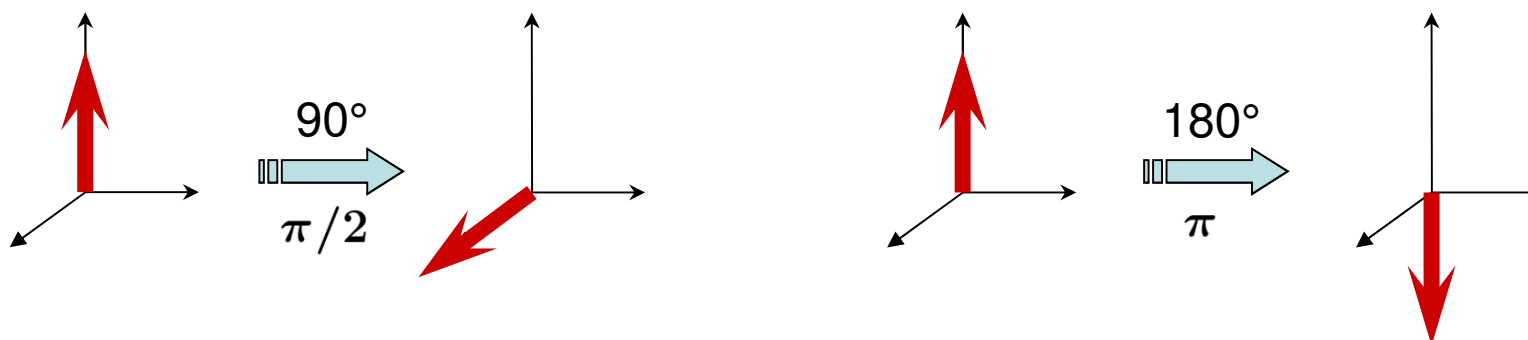
manipulace s magnetizací pomocí radiofrekvenčního magnetického pole B_1



rezonanční podmínka

$$\omega_{RF} = \gamma B_0$$

Pulsy



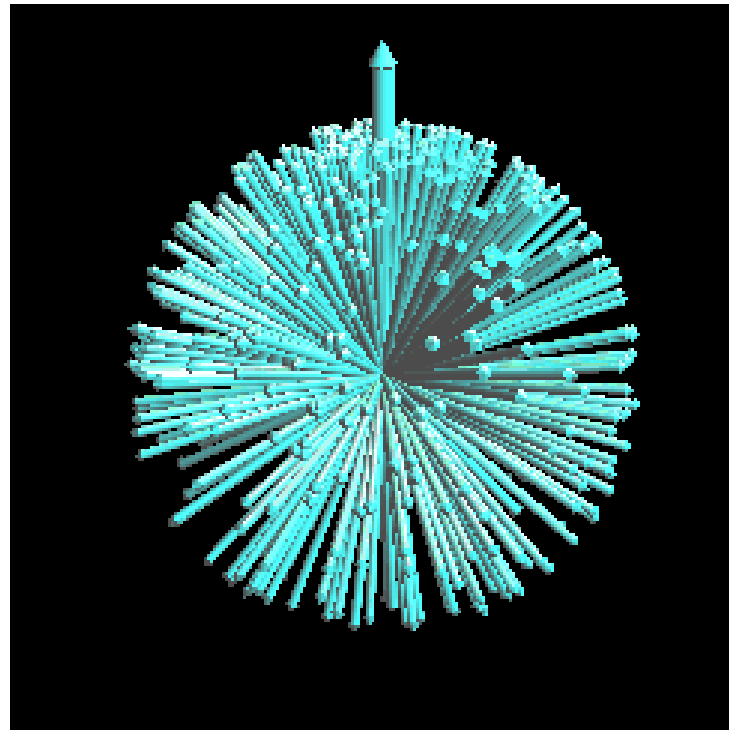
Radiofrekvenční pulsy

Lars G. Hanson: Bloch Simulator

<http://www.drmmr.dk/bloch>

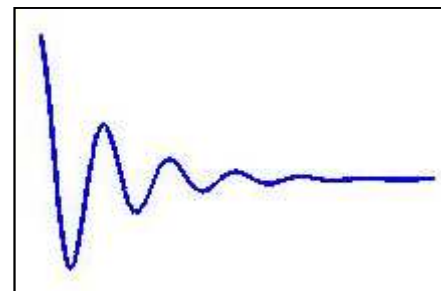
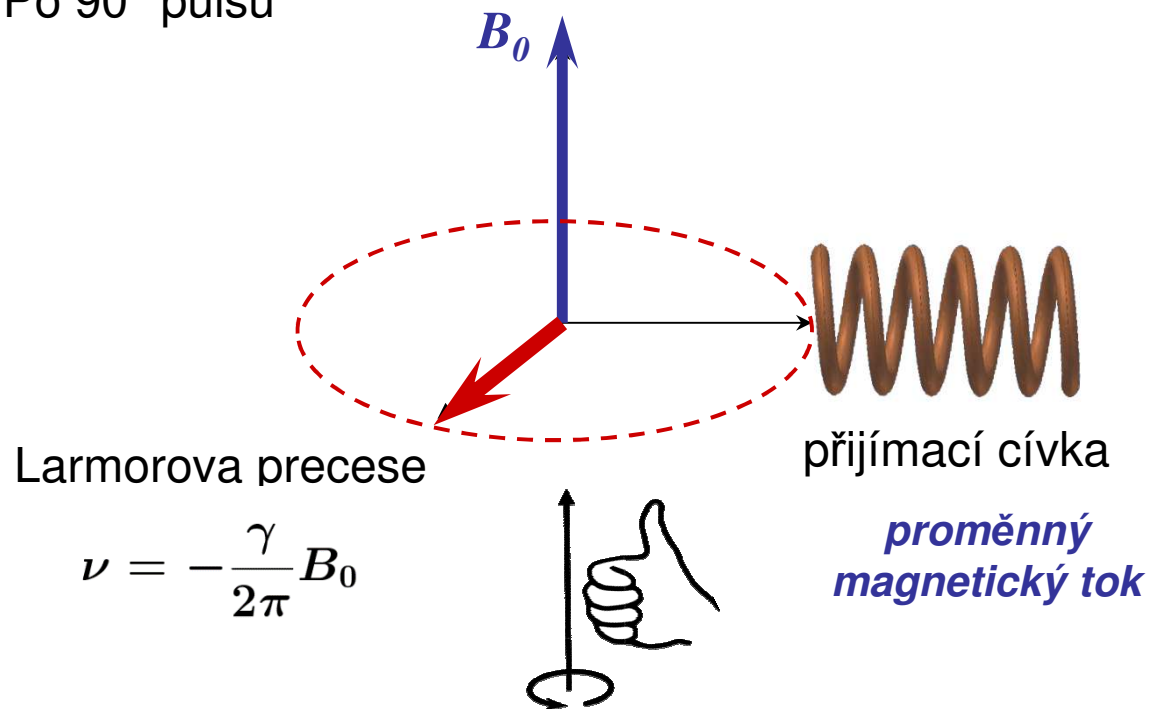
manipulace s magnetizací rf polem pouze pokud je v rezonanci s precesí

Excitace pro soubor spinů



Pulsní NMR

Po 90° pulsu

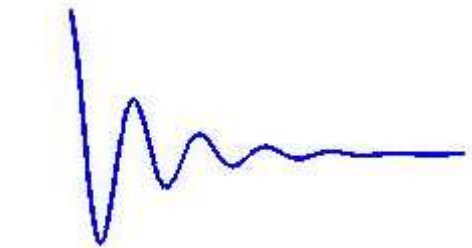


signál volné precese - FID

zviditelnění precese na makroskopické úrovni

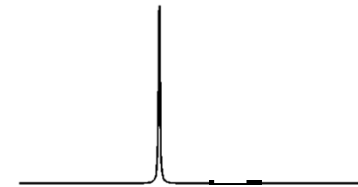
závislost frekvence na magnetickém poli, jaké jádro cítí

NMR spektrum



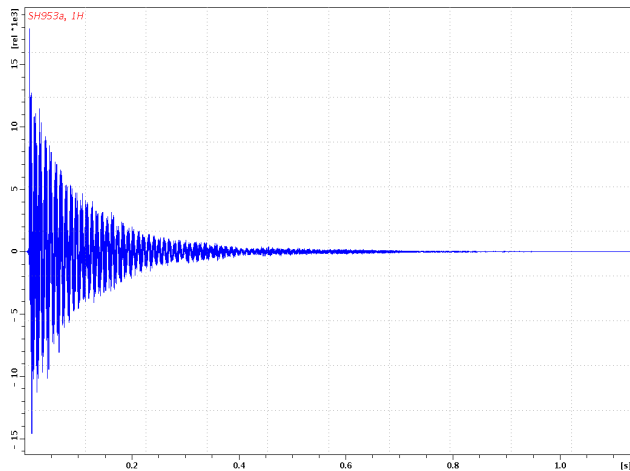
signál volné precese - FID

Fourierova transformace

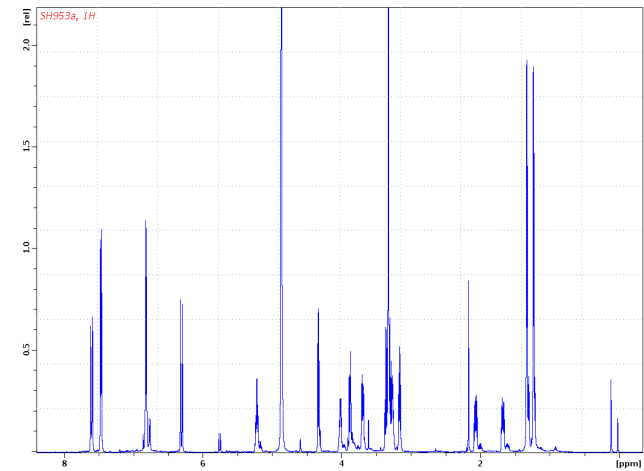


NMR spektrum

analyzuje periodicity časového signálu



Fourierova transformace



NMR jádra a jejich parametry

Jádro	Spin	Výskyt	γ [$10^7 \text{radT}^{-1}\text{s}^{-1}$]	NMR frek. (11,74 T)	Citlivost
^1H	$\frac{1}{2}$	99,99	26,75	500,0	100
^2H	1	0,01	4,11	76,8	0,0001
^{12}C	0	98,93	-	-	-
^{13}C	$\frac{1}{2}$	1,07	6,73	125,7	0,02
^{14}N	1	99,63	1,93	36,1	0,1
^{15}N	$\frac{1}{2}$	0,37	-2,71	50,7	0,0004
^{16}O	0	99,96	-	-	-
^{19}F	$\frac{1}{2}$	100	25,18	470,4	83
^{31}P	$\frac{1}{2}$	100	10,84	202,4	6,6

NMR frekvence

