

Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті
Техникалық физика кафедрасы

Ядролық Магниттік Резонанс (ЯМР)

5B060600-Химия мамандығы

Дайындады: Омербаев И.К. (ХМ-41)

Тексерді : Салиходжа Ж.М.

Астана, 2016

Магниттік резонанс — зат бөлшектерінің (электрондардың, атом ядроларының) магниттік моменттері бағдарларының өзгеруіне байланысты заттың белгілі бір жиіліктегі электрмагниттік толқындарды таңдап жұтуы. Магниттік моменті бар бөлшектің энергетикалық деңгейлері сыртқы магнит өрісінде магниттік қосалқы деңгейлерге жіктеледі; олардың әрқайсысына магнит өрісіне қатысты магнит моменттің белгілі бір бағдары сәйкес келеді (қ. Зееман эффектісі). Резонанстық жиіліктегі электр-магниттік өріс қосалқы магнит деңгейлер арасында кванттық ауысу туғызады.

Егер элетр-магниттік энергияны жұту процесі ядролар арқылы жүзеге асса, онда Магниттік резонанс ядролық магниттік резонанс (ЯМР) деп аталады. Парамагнит атомындағы қосарланбаған электрондардың магнит моменті нәтижесінде пайда болатын Магниттік резонансты электрондық парамагниттік резонанс (ЭПР) деп атайды. Магнит реттелген заттардағы электрондық Магниттік резонанс ферромагнит және антиферромагнит Магниттік резонанс деп аталады. Әдетте, қолданылатын магнит өрістерде (10^3 — 10^4 Гц) ЯМР-дың жиіліктері қысқа радиотолқындар диапазонына (10^6 — 10^7 Гц), ал ЭПР жиіліктері аса жоғары жиілік диапазонына (10^9 — 10^{10} Гц) орналасады. Магниттік резонанстың спектрлері затта әсер ететін әр түрлі ішкі өрістерге сезімтал келеді. Сондықтан Магниттік резонанс қатты денелердің және сұйықтықтардың құрылымын, атом және молекулалық динамиканы, т.б. зерттеу үшін қолданылады



Завойский Евгений Константинович (1907 - 1976)

1941 ж. - Ядролық Магниттік Резонанстын сигналін алғаш тіркеген уақыт

1944 ж. - Электрондық Парамагниттік Резонанстын ашылуы

Нобель сыйлығының лауреаттары



Физика – 1944

Isidor Isaac Rabi, USA

За резонансный метод записи магнитных свойств атомных ядер



Физика - 1952

Felix Bloch, USA

Edward Mills Purcell, USA

За создание нового метода измерения ядерной магнитной прецессии и последующие связанные с ним открытия



Химия - 1991

Richard R. Ernst, Switzerland

За вклад в развитие методологии спектроскопии ядерного магнитного резонанса (ЯМР) высокого разрешения



Химия - 2002

Kurt Wüthrich, Switzerland

За развитие методов спектроскопии ядерного магнитного резонанса для исследования трехмерной структуры биологических макромолекул в растворе



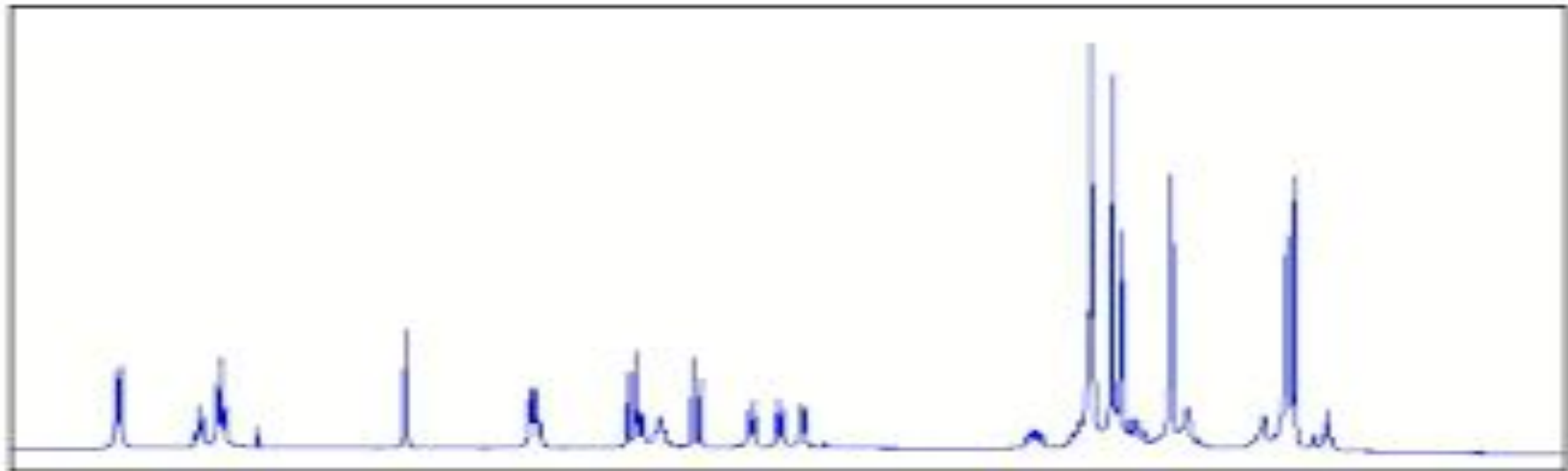
Физиология және медицина 2003

Paul C. Lauterbur, USA

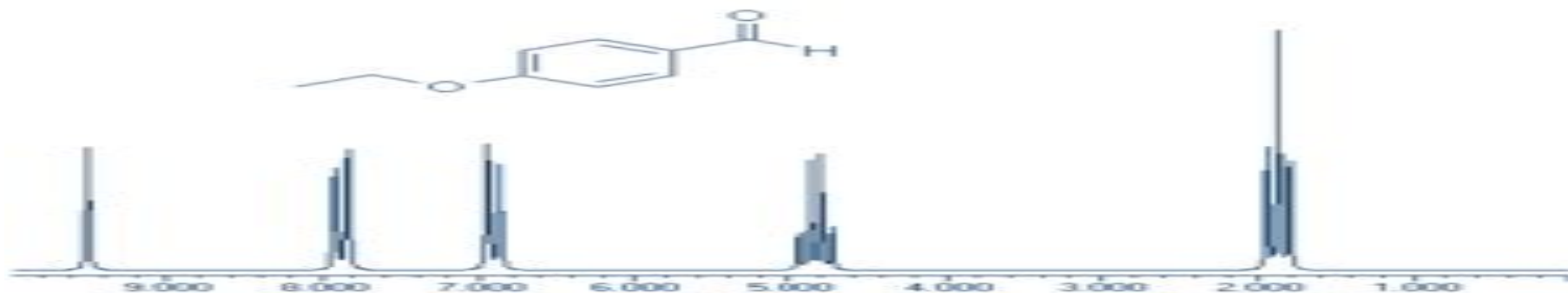
Sir Peter Mansfield, UK

За открытия в области визуализации био-объектов

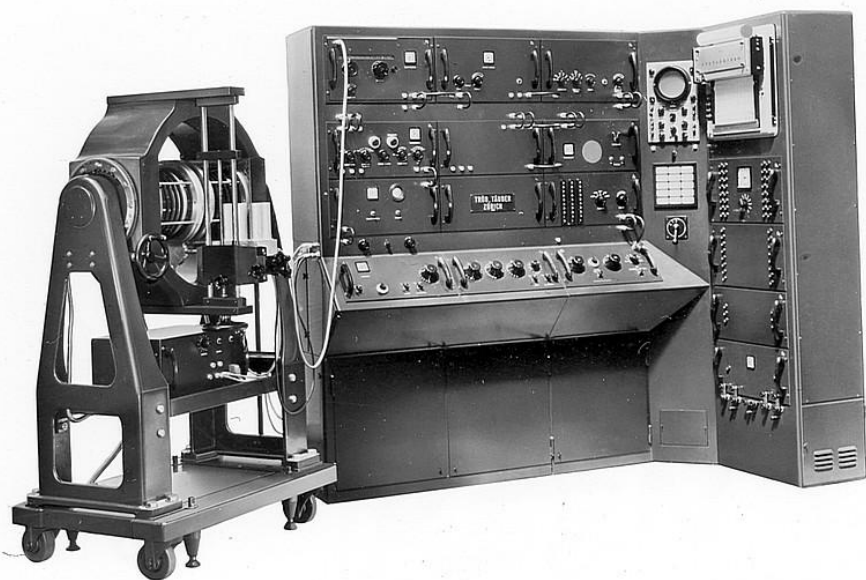
Ядролық магниттік резонанс (ЯМР) – қатты, сұйық және газ тәріздес денелерде радиожілік диапазонындағы электрмагниттік энергияның резонанстық жұтылуы. Мұндай резонанстық жұтылу құбылысы сыртқы магнит өрісіне орналасқан зат ядроларының магнетизміне байланысты пайда болады. Бұл құбылыстың резонанстық сипаты қозғалыс мөлшерінің моменті мен магниттік моменті бар ядролардың қасиетіне сәйкес анықталады.



Мұндай ядроның сыртқы магнит өрісімен (H_0) әсерлесуі меншікті, яғни пресцессия жиілігін (ω_0) анықтайды: $\omega_0 = \gamma H_0$, мұндай γ – гирромагниттік қатынас, яғни ядроның магниттік моментінің оның қозғалыс мөлшері моментіне қатынасы. Тәжірибеден негізінен осы меншікті жиіліктің мәні анықталады. Көптеген ядролар үшін бұл жиілік 1 – 10 МГц аралығында. Сыртқы магнит өрісі болмаған кезде ядролардың магниттелушілігі әлсіз (электрондық парамагнетизмнен 10^6 – 10^8 есе кем) болады. Резонанстық жиіліктегі радиожиіліктік өріс ядролардың айналуы бағытын өзгертеді, яғни ядролық магниттелушіліктің прецесс. қозғалысын тудырады. Бұл қозғалыс зерттелмекші затты қоршаған индуктивтілік орамада пайда болатын индукциялық ЭК арқылы анықталады.



Сканерлі ЯМР-спектроскопиясы



Алғашқы ЯМР
спектрометрлерінің бірі,
Bruker фирмасы



Жаңа электромагнитті ЯМР
спектрометр

Физико-химиялық комплекстер



ЯМР-спектрометри мен сұйық хроматограф

Қазіргі заманғы приборлар. Орта класс.



Фурье–ЯМР-спектрометр Bruker Avance III 500

Қолданысқа түскен уақыт: **2009**



Қазіргі заманғы приборлар. Топ-моделдер.



Магнит спектрометра
ЯМР на 1000 МГц

Bruker

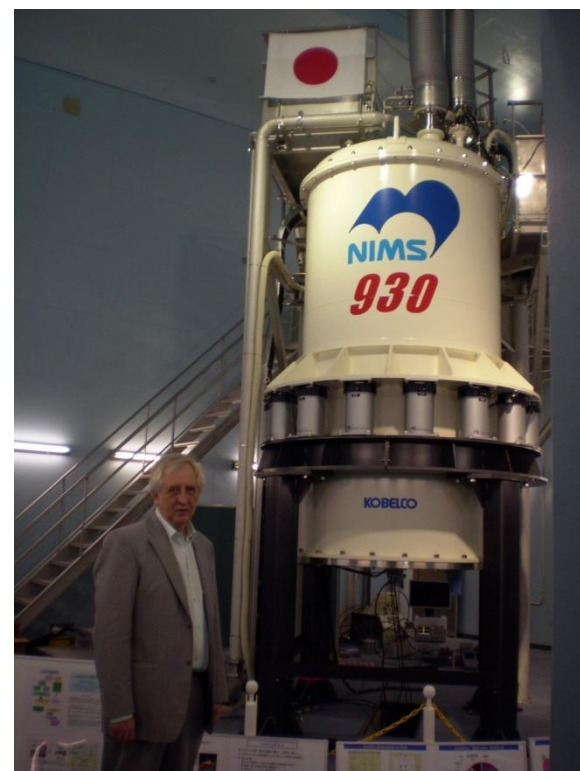
Германия



Магнит спектрометра
ЯМР на 900 МГц

Varian (Agilent)

США



Магнит спектрометра
ЯМР на 930 МГц

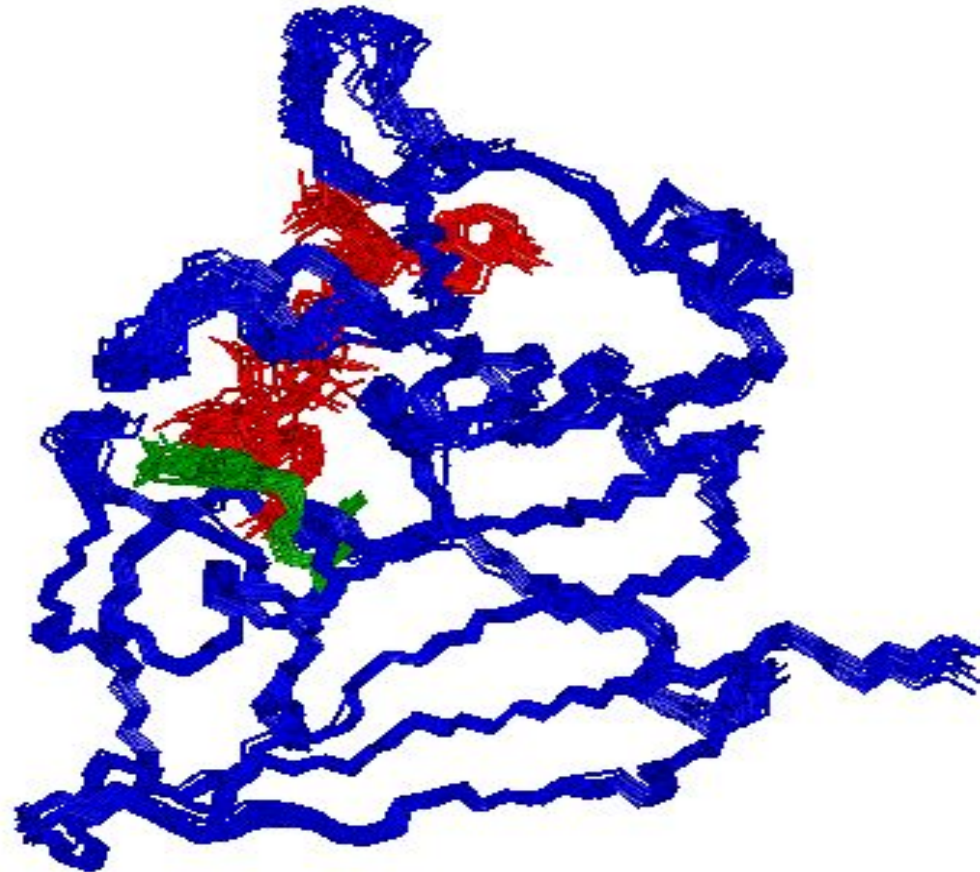
Jeol

Япония

ЯМР қолдану саласы

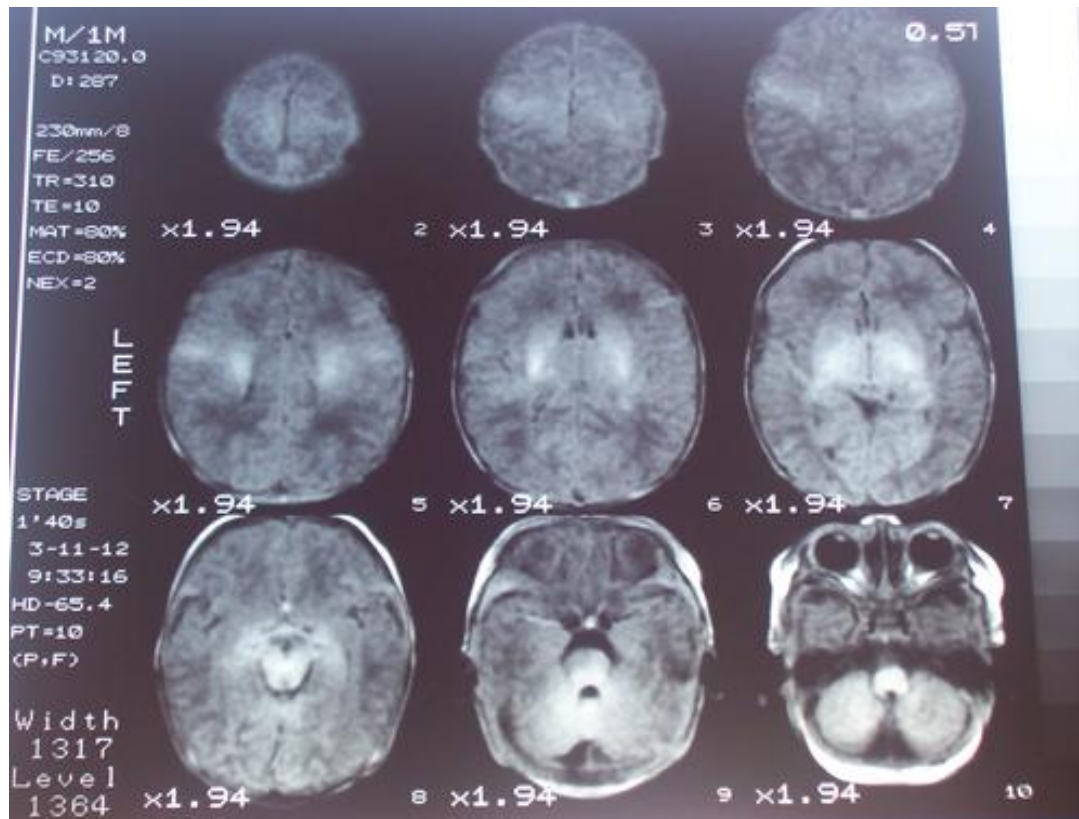
- ❖ Органикалық және бейорганикалық қосылыстардың құрылысы мен қасиетін зерттеу.
- ❖ Молекулалардың динамикалық қасиеттерің зерттеу (таутомерия, изомерия).
- ❖ Процесстерді зерттеу (кинетика, термодинамика, титрлеу).
- ❖ Биомакромолукалардың құрылысын анықтауда:
 - Ақуыз-лигандті әрекеттесуін зерттеу (биологиялық активті қосылыстардың ЯМР-скринингі)
 - Биологиялық сұйықтардың құрылымының мониторингі (метабономика)
- ❖ Тірі және өлі табиғат объектісін визуалдау (ЯМР-томография)
 - Тірі ағзада өтетін процесстердің мониторингі (in-vivo спектроскопиясы)
 - Мидің функционалды активтілігін зерттеу (f-MRI)

ЯМР қолдану саласы

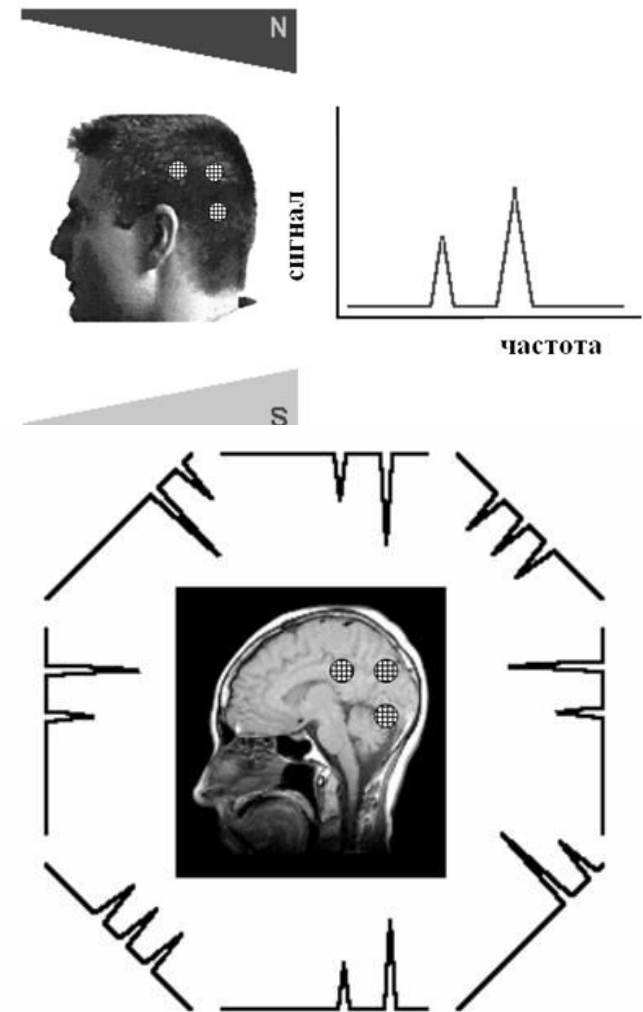


Структура высокого разрешения в растворе для комплекса дигидрофолатредуктазы (16 кДа) с триметопримом и НАДФН

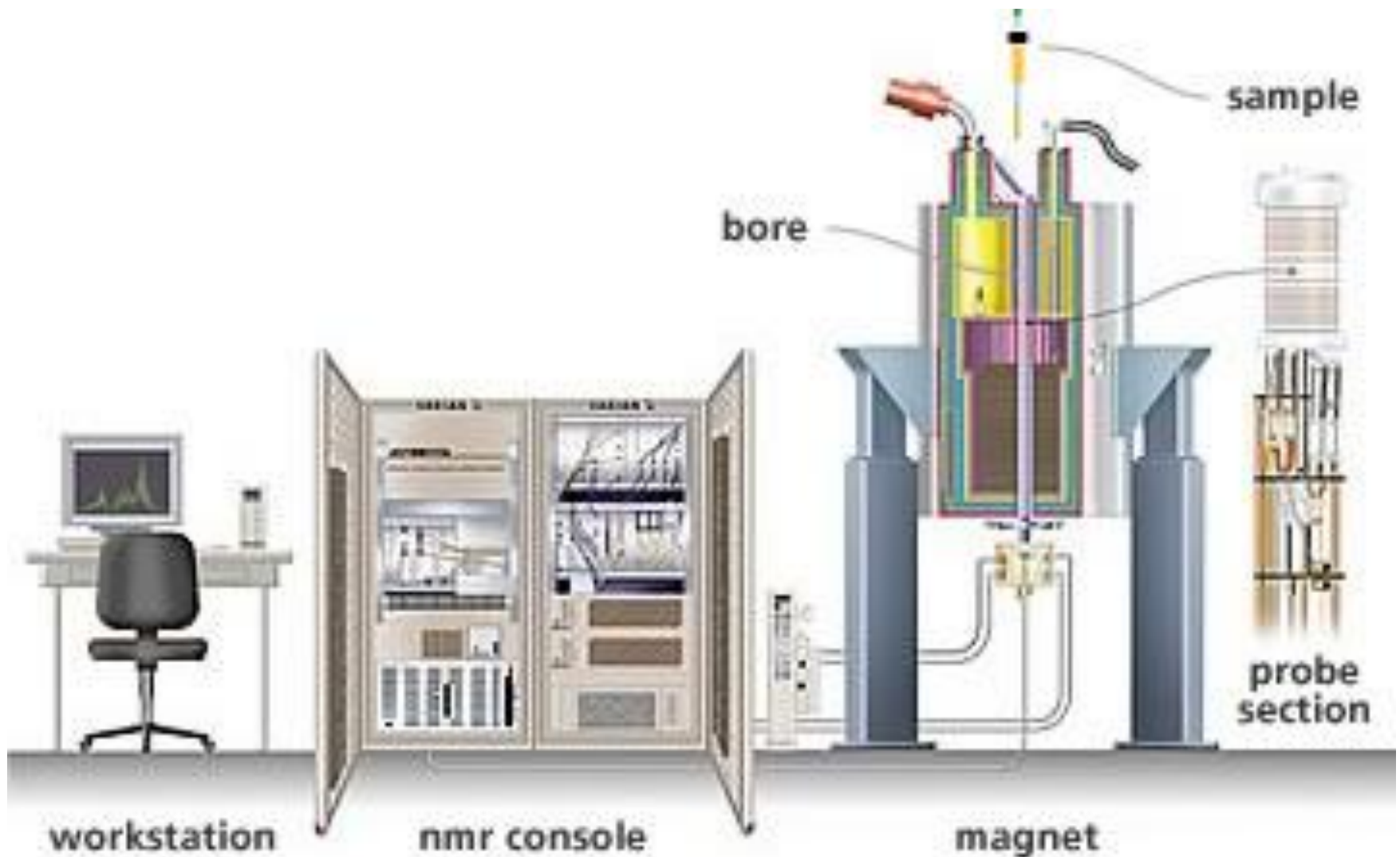
ЯМР қолдану саласы



ЯМР – томография головного мозга



Спектрометр құрылысы

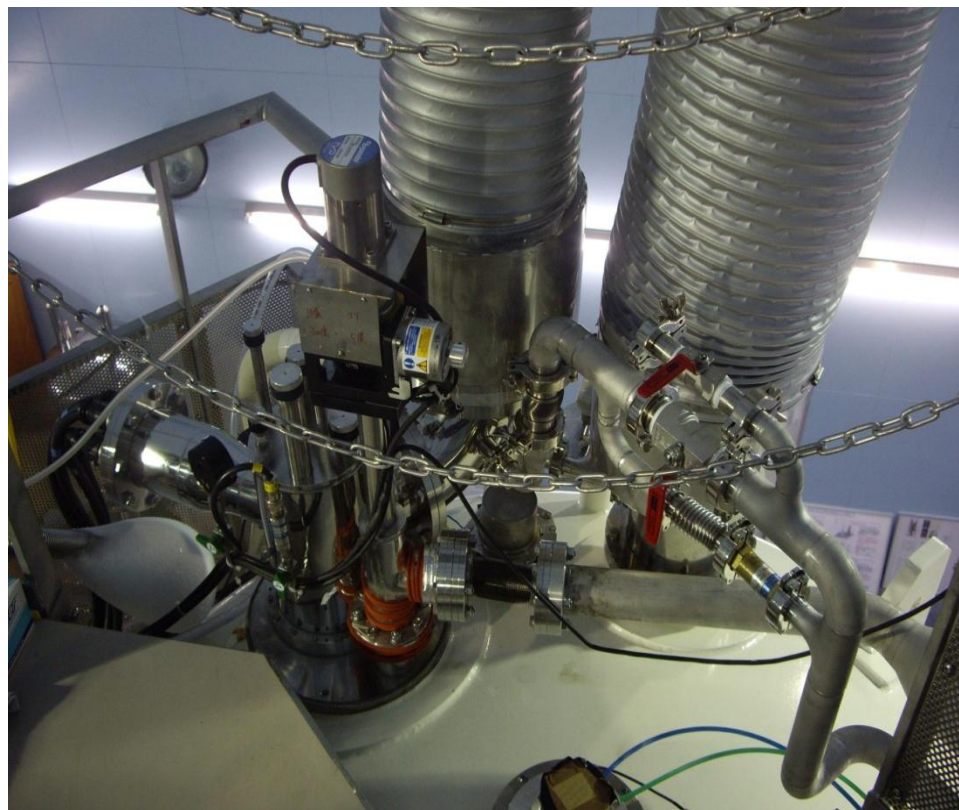


Спектрометр құрылысы



Магнит

Спектрометр құрылысы



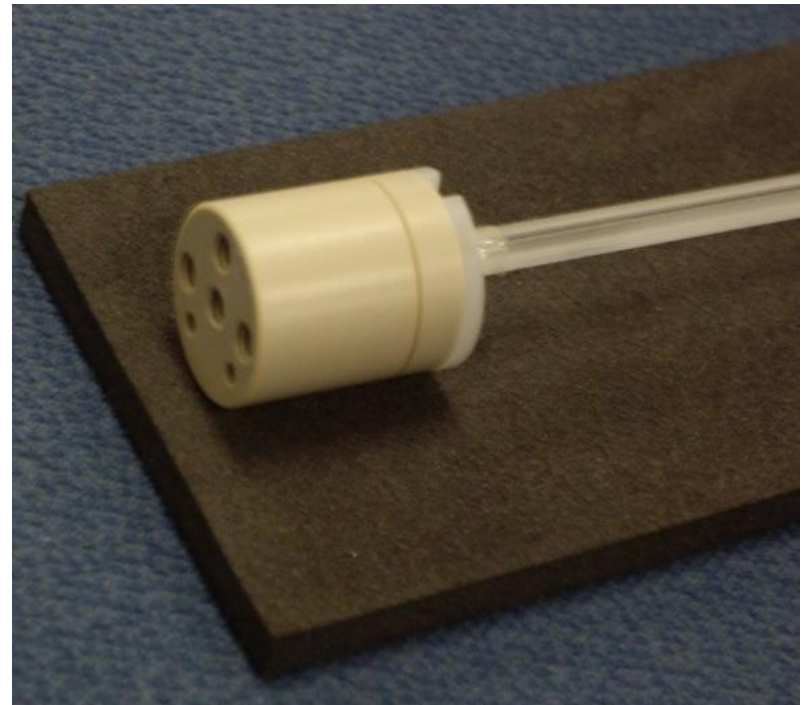
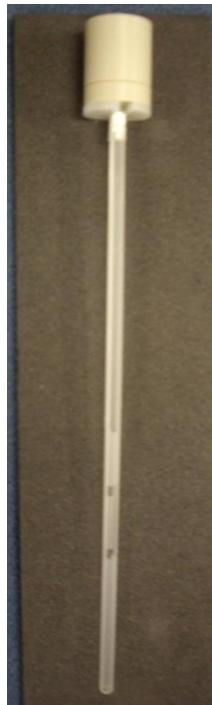
Магнит

Спектрометр құрылысы



Робот для автоматической
смены ампул (автосамплер)
на 100 образцов.

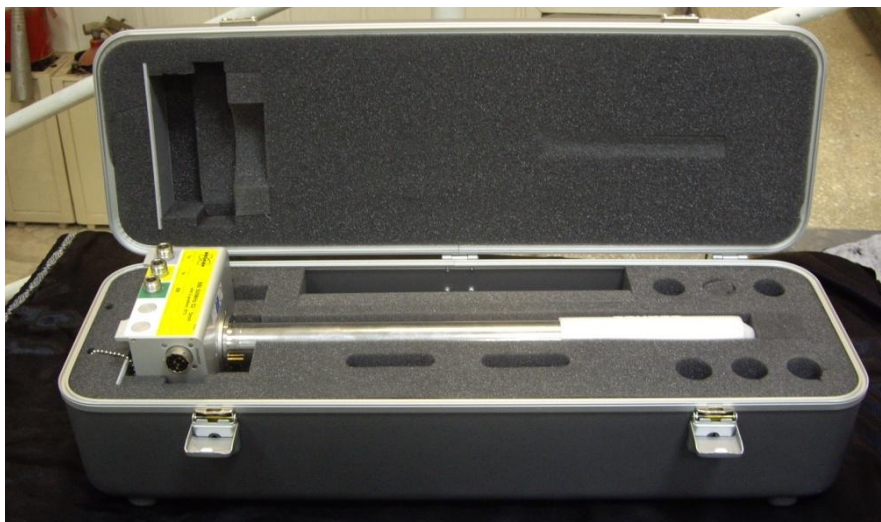
Jeol



Реактор для исследования
процессов *in situ*

Jeol

Спектрометр құрылысы



Датчик

Сипаттамалары

- Диапазон частот (QNP, BB)
- Взаимное расположение катушек (BBI, BBO)
- Количество каналов
- Диаметр ампулы
- Дополнительные параметры

Спектрометр құрылысы

Ампулалар



Набор для пробоподготовки для жидкостного датчика:

- дозаторы
- пипетка
- склянка с дейтерорастворителем
- ампулы 5 мм
- ампула 10 мм
- колпачки



Набор для пробоподготовки для твердотельного датчика:

- воронка
- ампула
- крышка
- экстрактор

Сынақ дайындау (Пробоподготовка)



Сынама дайындау



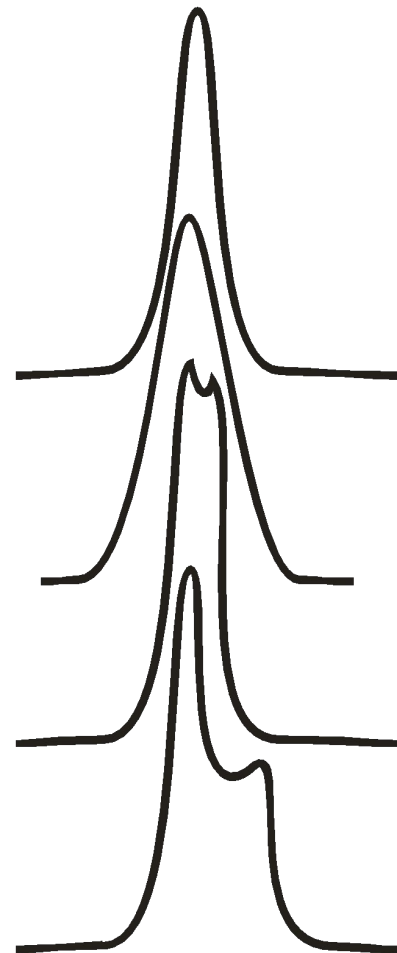
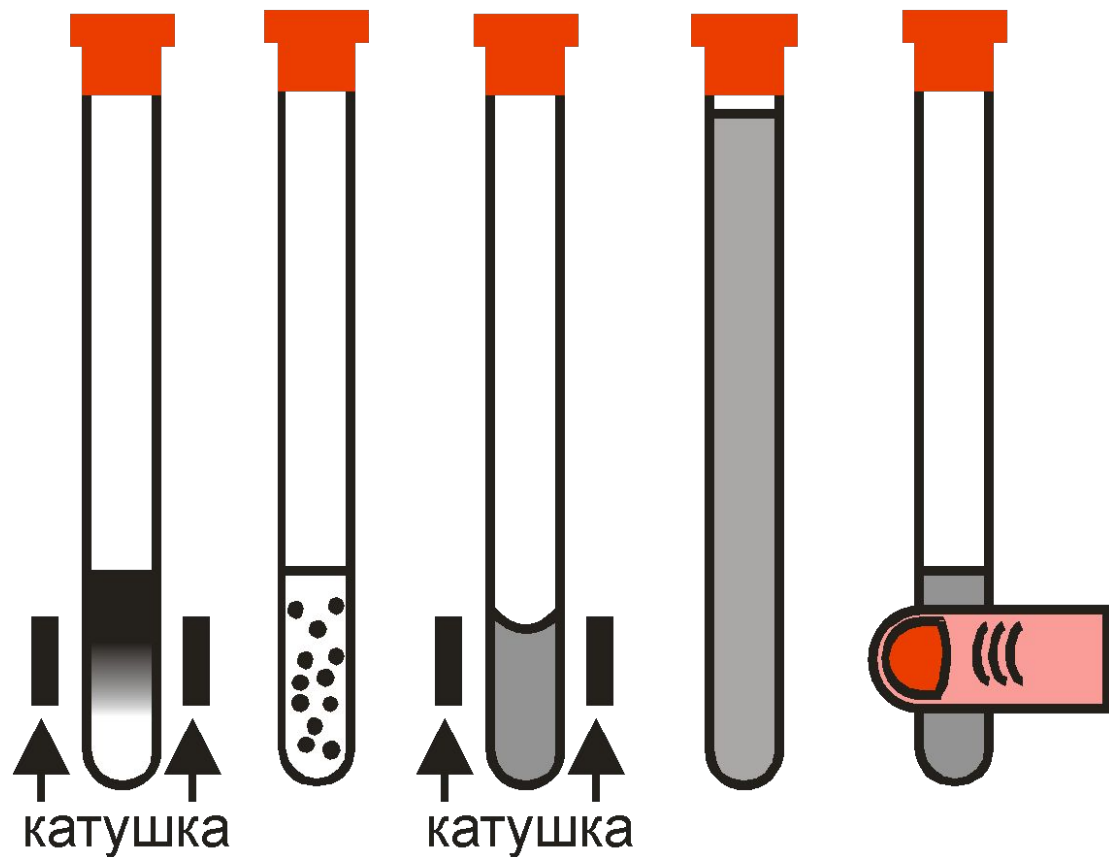
- Чистая ампула

- Однородный раствор

- Объем раствора (15-17 мм) - Плотно надетый колпачок

Сынама дайындау

Қалай жасауға болмайды



Қолданылған әдебиет тізімі

1. www.ru.Wikipedia.org
2. www.kz.Wikipedia.org
3. www.okymaterialdari.com
4. *Калабин.* Природная спектроскопия ЯМР, природного органического сырья.
5. *Абрагам А.* Ядерный магнетизм. - М.: Издательство иностр. лит., 1963.
6. *Сликтер Ч.* Основы теории магнитного резонанса. - М.: Мир, 1981.