

A large, industrial NMR spectrometer with a circular top section and a central column, surrounded by metal railings and stairs. The machine is situated in a laboratory or industrial setting.

ΠΥΡΗΝΙΚΟΣ ΜΑΓΝΗΤΙΚΟΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ (NMR)

ΚΑΡΑΖΕΠΟΥΝΗΣ ΔΗΜΗΤΡΗΣ
ΑΨ:3643

Αρχικά:

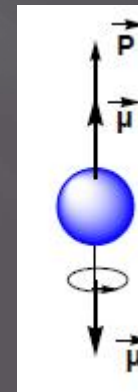
- ▣ Ο Πυρηνικός μαγνητικός Συντονισμός (NMR) είναι ένα φαινόμενο που συμβαίνει όταν πυρήνες ορισμένων ατόμων τοποθετούνται εντός ενός ομογενούς, στατικού μαγνητικού πεδίου και διεγείρονται από ένα δεύτερο ταλαντευόμενο μαγνητικό πεδίο. Οι περισσότεροι πυρήνες εμφανίζουν το φαινόμενο NMR, άλλοι (οι λιγότεροι) όχι. Αυτό εξαρτάται από το εάν οι πυρήνες έχουν μαγνητικές ιδιότητες, όπως αυτές αντανακλώνται στην ιδιότητα του σπιν.

Τι είναι το σπίν ???

Είναι μια θεμελιώδης ιδιότητα της ύλης, όπως η μάζα ή το ηλεκτρικό φορτίο και αναφέρεται στην αυτοπεριστροφή γύρω από ένα φανταστικό άξονα υποατομικών, μεμονωμένων σωματιδίων (ηλεκτρονίων, πρωτονίων, νετρονίων), τα οποία χαρακτηρίζονται από μαγνητικό κβαντικό αριθμό $+1/2$ ή $-1/2$. Λόγω της περιστροφής το σωματίδιο εμφανίζει ιδιοστροφομή ή **σπιν**

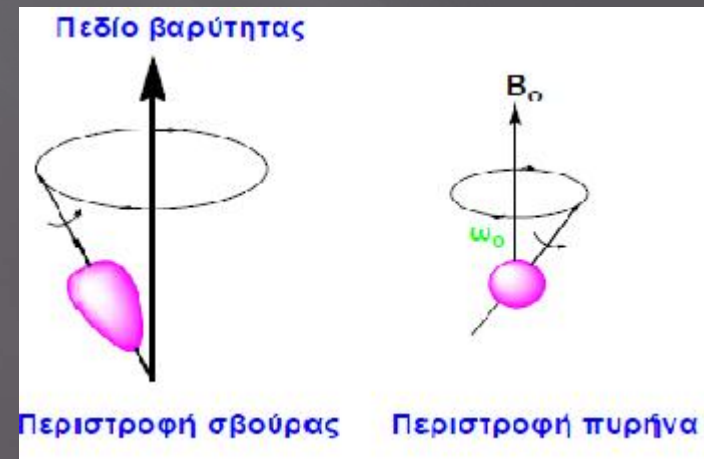
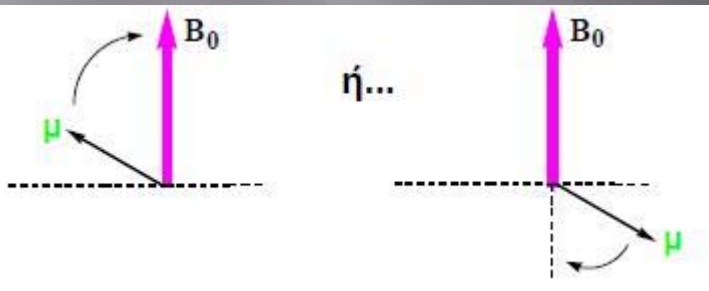
Πυρηνικό σπιν πρωτονίου

- Ο πυρήνας του ατόμου του υδρογόνου έχει ένα πρωτόνιο, το οποίο εκδηλώνει την ιδιότητα του σπιν. Η ύπαρξη του σπιν συνεπάγεται εγγενή πυρηνική μαγνητική ροπή. Δηλαδή το πρωτόνιο συμπεριφέρεται ως ένα μαγνητικό δίπολο ή ως ένας μικροσκοπικός μαγνήτης . Το άνυσμα της μαγνητικής ροπής, μ , είναι συγγραμμικό με το άνυσμα της ιδιοστροφορμής, P



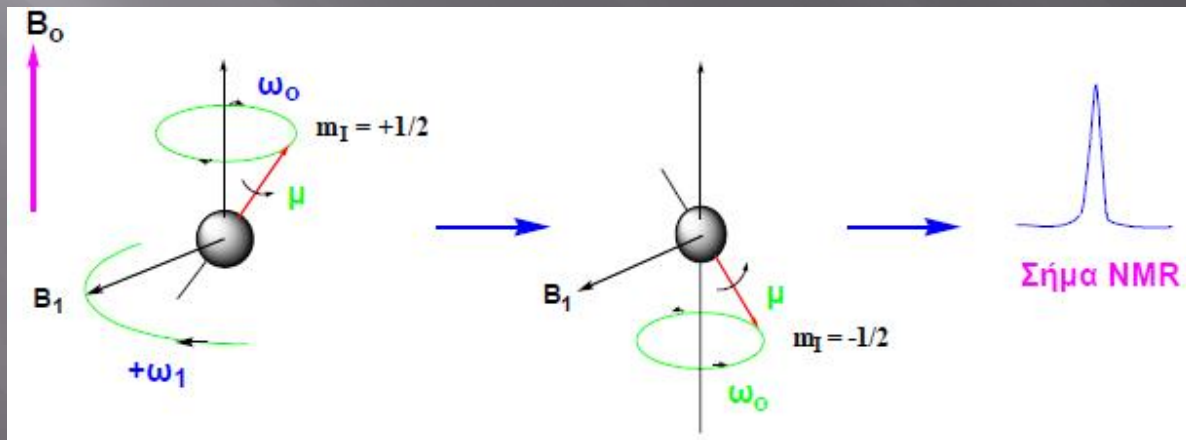
Μεταπτωτική κίνηση

- Όταν ο πυρήνας εισέλθει στο μαγνητικό πεδίο B_0 , το πεδίο αλληλεπιδρά με τη μαγνητική ροπή μ και αναπτύσσεται μια ροπή στρέψης, η οποία τείνει να ευθυγραμμίσει τη μ με το πεδίο B_0 , ανεξάρτητα από τον αρχικό προσανατολισμό της (εικόνα αριστερά). Ο πυρήνας, επομένως, υφίσταται δύο δυνάμεις. Η μία τείνει να ευθυγραμμίσει τη μ με το B_0 , ενώ η άλλη, λόγω της ιδιοστροφορμής, θέλει τον πυρήνα να αυτοπεριστρέφεται. Η μ καταλήγει τελικά να εκτελεί μία μεταπτωτική κίνηση γύρω από το B_0 , όπως ακριβώς η σβούρα γύρω από την ένταση του πεδίου βαρύτητας (εικόνα δεξιά).

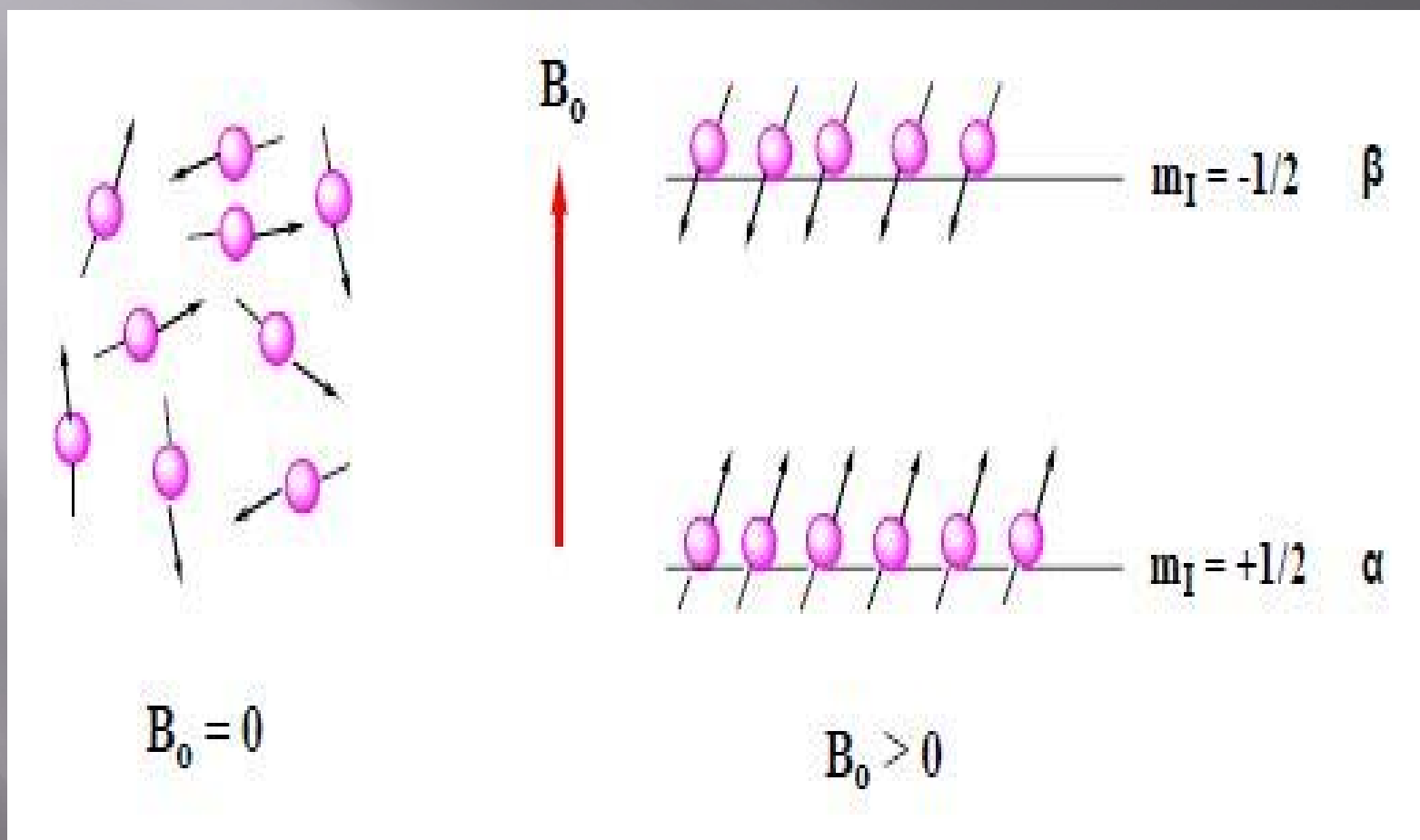


Το φαινόμενο NMR

- Για να διεγερθούν οι πυρήνες πρέπει να απορροφήσουν ενέργεια από κάποια πηγή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας . Η διέγερση των πυρήνων γίνεται με την εφαρμογή ενός δεύτερου μαγνητικού πεδίου B_1 το οποίο τοποθετείται κατά μήκος του τον άξονα x , έτσι ώστε το πεδίο B_1 να εφαρμόζεται κάθετα προς το B_0 . Απαραίτητη συνθήκη συντονισμού $\omega_0 = \omega_1$ για την παραγωγή σήματος NMR όπου η συχνότητες εξαρτώνται από την ισχύ του μαγνητικού πεδίου & τις μαγνητικές ιδιότητες του ισότοπου.



Σύνολο πυρήνων και κατανομή Boltzmann



ΧΡΗΣΕΙΣ (NMR)

- ▣ Η φασματοσκοπία NMR βρίσκει εφαρμογές σε πολλούς επιστημονικούς κλάδους. Η φασματοσκοπία NMR μιας διάστασης χρησιμοποιείται σχεδόν αποκλειστικά από τους χημικούς στη μελέτη της δομής χημικών ενώσεων. Τεχνικές NMR δύο ή περισσότερων διαστάσεων (πολυδιάστατο NMR) χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό της δομής πολύπλοκότερων μορίων, π.χ. πρωτεϊνών. Τεχνικές NMR στο χώρο του χρόνου (πυρηνικής μαγνητική αποδιέγερση) χρησιμοποιούνται για τη μελέτη της δυναμικής ενώσεων σε διαλύματα. Τέλος, η φασματοσκοπία NMR χρησιμοποιείται ευρέως για τη μελέτη της δομής και δυναμικής ενώσεων σε στερεά κατάσταση.

Εφαρμογές

▣ Διερεύνηση δομής

1. Χημεία Φυσικών προϊόντων
2. Συνθετική οργανική χημεία

▣ Μελέτη δυναμικών φαινομένων

1. Χημική κινητική
2. Χημική ισορροπία

▣ Προσδιορισμός τρισδιάστατης δομής

1. Πρωτεΐνες
2. DNA, RNA
3. Σύμπλοκα πρωτεΐνη/DNA, πρωτεΐνη/RNA Πολυσακχαρίτες

▣ Σχεδιασμός φαρμάκων

1. Σχέση δομής-δραστικότητας

▣ Πολυμερή, συμπολυμερή και πολυμερικά μίγματα

1. Σύσταση και δομή
2. Συμβατότητα
3. Δυναμική

▣ Ιατρική - MRI

ΕΥΧΑΡΙΣΤΩ

THIS IS
THE END