

# Zprovoznění experimentu jaderná magnetická rezonance

J. Kubant

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Břehová 7, 115 19 Praha 1  
kubanja7@fjfi.cvut.cz

## Abstrakt

Nejprve jsme zprovožňovali aparaturu na jadernou magnetickou rezonanci. Poté jsme pomocí této aparatury změřili g-faktory vodíku a fluoru. Dosáhli jsme rovněž rezonance u mnoha látek, mj. u krve a polystyrenu. Posledním měření bylo porovnání množství vodíku v ovoci a ve vodě a následné vypočítání poměrného zastoupení vodíku v ovoci.

## 1 Úvod

Jaderná magnetická rezonance (dále NMR) je fyzikální jev založený na kvantových mechanických vlastnostech atomového jádra. NMR můžeme použít na všechna jádra, která mají nenulový celkový spin. Nejčastěji měřenými jádry jsou vodík  $H_1$  (nejčastější izotop v přírodě) a uhlík  $C_{13}$ . Avšak rezonance může být pozorována i u mnoha jiných izotopů (např. při našem měření  $F_{19}$ ).

Studium jader pomocí NMR probíhá tak, že směr spinů jader srovnáme pomocí konstantního magnetického pole a poté srovnáme i jejich precesní pohyb střídavým magnetickým polem. V tomto uspořádání dojde k rezonanci vzorku a z toho jak a za jaké velikosti magnetického pole u vzorku k rezonanci dochází můžeme o vzorku mnohé zjistit.

## 2 Teorie

Základní částice, neutrony a protony mají vlastní hodnotu spinu. Celkový spin jádra je dán spinovým kvantovým číslem. Pokud se nukleony párují tak se spin se vzájemně vyruší a celkový spin je nulový. V ostatních případech je spin jádra nenulový. Z toho vyplývá rovnice pro magnetický moment  $\mu$ :  $\mu = \gamma I$ , kde proporční konstanta  $\gamma$  je gyromagnetický poměr,  $I$  je spin jádra

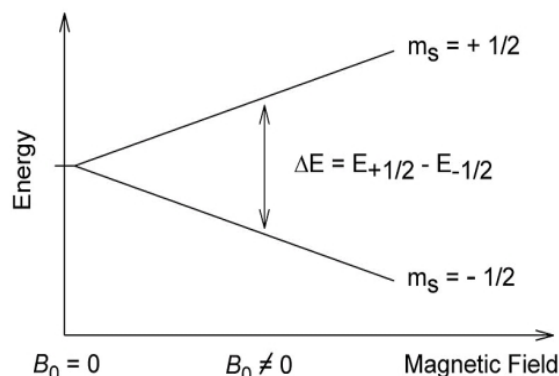
Když dáme volný systém s konstantním gyromagnetickým poměrem, jako je jádro, nebo elektrony, do externího magnetického pole, které není ve stejném směru s jeho magnetickým momentem, bude tento systém vykonávat precesi o frekvenci úměrné vnějšímu poli podle rovnice:

$$f = \frac{g \mu_N}{2\pi}$$

To přepsáno v termínech jaderné fyziky:  $\gamma = \frac{g \mu_N}{\hbar} \Rightarrow f_{precese} = \frac{g \mu_N B_0}{\hbar}$

Kde  $g$  je g-faktor zvoleného jádra a  $\mu_N$  je jaderný magneton (konstanta mag. Momentu). Spin jádra je složením spinů těch nukleonů jádra, které nejsou spárovány.

Zaměřme se tedy na jádra se spinem 0,5 (jako  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$ ). Tato jádra mají dva možné spinové stavy  $+0,5$  ;  $-0,5$ , pokud je vložíme do externího magnetického pole, jejich energetické hladiny se rozštěpí (viz obr. 1).



Obr. 1 Rozštěpení energetických hladin atomu

Energii jádra  $\mu$  v magnetickém poli  $B_0$  (nulový dolní index je užívaný pro rozlišení tohoto magnetického pole od jiného aplikovaného pole) dostaneme záporným skalárním vynásobením vektorů:  $E = -B_0 \cdot \mu = -\mu_0 B_0$ , kde magnetické pole a magnetický moment jsou orientovány podél osy z, a proto se skládají přímo, bez cosinové složky.

Za magnetický moment můžeme dosadit spin:

$$I = m \hbar$$

Z toho:

$$E = -m \hbar \gamma B_0$$

Následkem toho má jádro různé stavy energie v nenulovém magnetickém poli. Energetický rozdíl mezi těmito dvěma stavy je:

$$E_{spin=\frac{1}{2}} + E_{spin=-\frac{1}{2}} = \Delta E = \hbar \gamma B_0$$

K rezonanci dojde, když energie ( $E = hf$ ) elektromagnetického záření se bude rovnat tomuto energetickému rozdílu. Z toho důvodu se pohlcení bude vyskytovat když:

$$f = \frac{\Delta E}{h} = \frac{\gamma B_0}{2\pi}$$

To je toto rezonanční pohlcení energie, které se využívá v NMR.

### Intenzita signálů

Pokud v jednom spektru jsou společně měřena vždy jádra stejného prvku, ve stejném magnetickém poli a při stejné teplotě, je plocha každého signálu úměrná počtu *chemicky ekvivalentních* jader v molekule. Intenzity nejsou představovány výškou pásů, ale jejich plochou, proto se nazývají integrální intenzity. Můžeme tedy zjistit obsah určitého prvku ve vzorku, pokud známe obsah určitého prvku v jiném vzorku.

## Rozeznávání různých izotopů

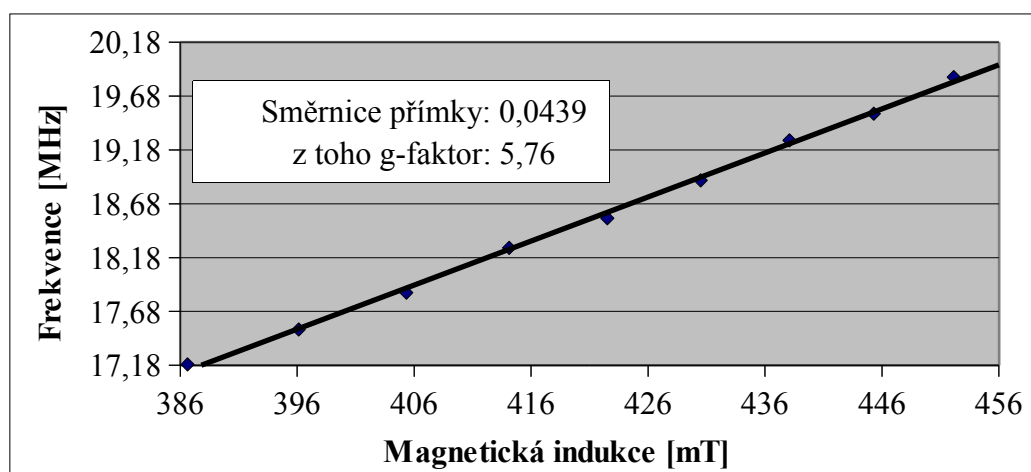
Z předchozích informací by se mohlo zdát, že na tom v jaké molekule jádro je, nezáleží a rezonuje vždy při stejné Larmorově frekvenci. Ale kvůli tomu, že jádra stejného izotopu, která nemají stejné chemické okolí (tedy nejsou chemicky ekvivalentní), se liší rozložením elektronů ve svém okolí a tím sice velmi nepatrně, ale pozorovatelně, intenzitou stínění, dojde k jevu, který je nazýván *chemický posun*. K rezonanci tedy dojde až při vyšším magnetickém poli při shodné Larmorově frekvenci, jak to vyplývá z rovnice:

Kde  $B_0$  je velikost odstíněného magnetického pole a  $B$  je výsledné mag. pole které jsme museli vytvořit, aby k rezonanci došlo. Tento posun se dá velmi dobře využít při zkoumání vzhledu molekul, a ke zjištění v jakých molekulách se jádro nachází. Bohužel naše přístroje nejsou na toto měření dostatečně přesné, zkoumá se totiž chemický posun v jednotkách ppm (miliontiny vnějšího mag. pole), které nám splývají do jednoho signálu.

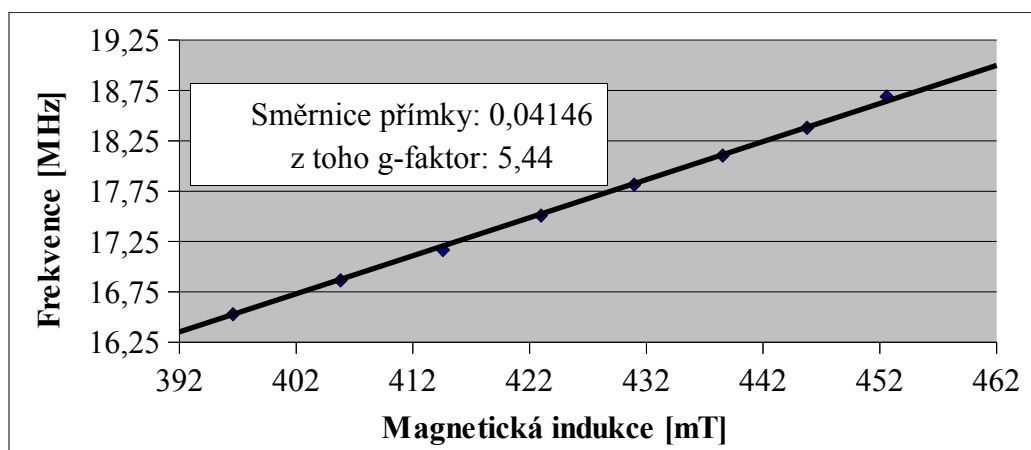
## 4 Výsledky měření

### G faktor

Proměřili jsme nejprve působení magnetického pole, které působí na vzorek v závislosti na velikosti proudu v cívkách. Poté jsme si zaznamenali velikosti frekvence, při které u vzorku dochází k rezonanci, pro různé hodnoty proudu. Data jsme proložili přímkou metodou nejmenších čtverců. Ze sklonu přímky jsme poté dopočítali g-faktor rezonujícího prvku ve vzorku.



Graf 1, g-faktor vodíku



Graf 2, g-faktor fluoru

### Obsah vodíku v ovoci

Jak bylo vysvětleno v teorii, pro změření obsahu vodíku v ovoci jsme potřebovali znát obsah vodíku v nějaké jiné látce. Touto látkou byla pro nás voda, spočítali jsme tedy plochu rezonanční křivky vody, banánu a jablka, a poté jen trojčlenkou dopočítali obsah vodíku v ovoci.

| Sample | Area     | Quantity H [%] |
|--------|----------|----------------|
| Water  | 0,017516 | 11.11%         |
| Banana | 0,048454 | 30.73%         |
| Apple  | 0,058327 | 37%            |

Tab. 1 Obsah vodíku v ovoci

## 5 Poděkování

Děkuji Tomáši Přeučilovi za spolupráci na projektu, na kterém jsme oba spolupracovali rovným dílem. Děkuji našim školitelům ing. Davidu Tlustému a ing. Michalu Petráňovi za nenahraditelnou pomoc s projektem. A také děkuji ing. Vladimíru Pospíšilovi za zapůjčení aparatury na naší prezentaci na fyzikálním semináři.

## Reference

- [1] Leybold didactic, Nuclear magnetic resonance in polystyrene, glycerine and teflon, [http://www.leybold-didactic.de/literatur/hb/e/p6/p6531\\_e.pdf](http://www.leybold-didactic.de/literatur/hb/e/p6/p6531_e.pdf)
- [2] Úlehla I., Suk M., Trka Z., *Atomy, jádra, částice Academia*, Praha 1990. ISBN 80-200-0135-2
- [3] Ing, Richard Hrabal, Csc. Přednáška o jaderné magnetické rezonanci <http://www.vscht.cz/nmr/predmet/lekce/NMR-lekce1.pdf>
- [4] kol. autoru, Nuclear Magnetic Resonance, Wikipedia, [http://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear\\_magnetic\\_resonance](http://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_magnetic_resonance)