



جامعة بغداد

كلية التربية للعلوم الصرفة / اية الفيزياء

قسم الكيمياء

مطابقة الرنين النووي المغناطيسي

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy

H^1 NMR

Dr. Sabah talib najim

Dr. Amina

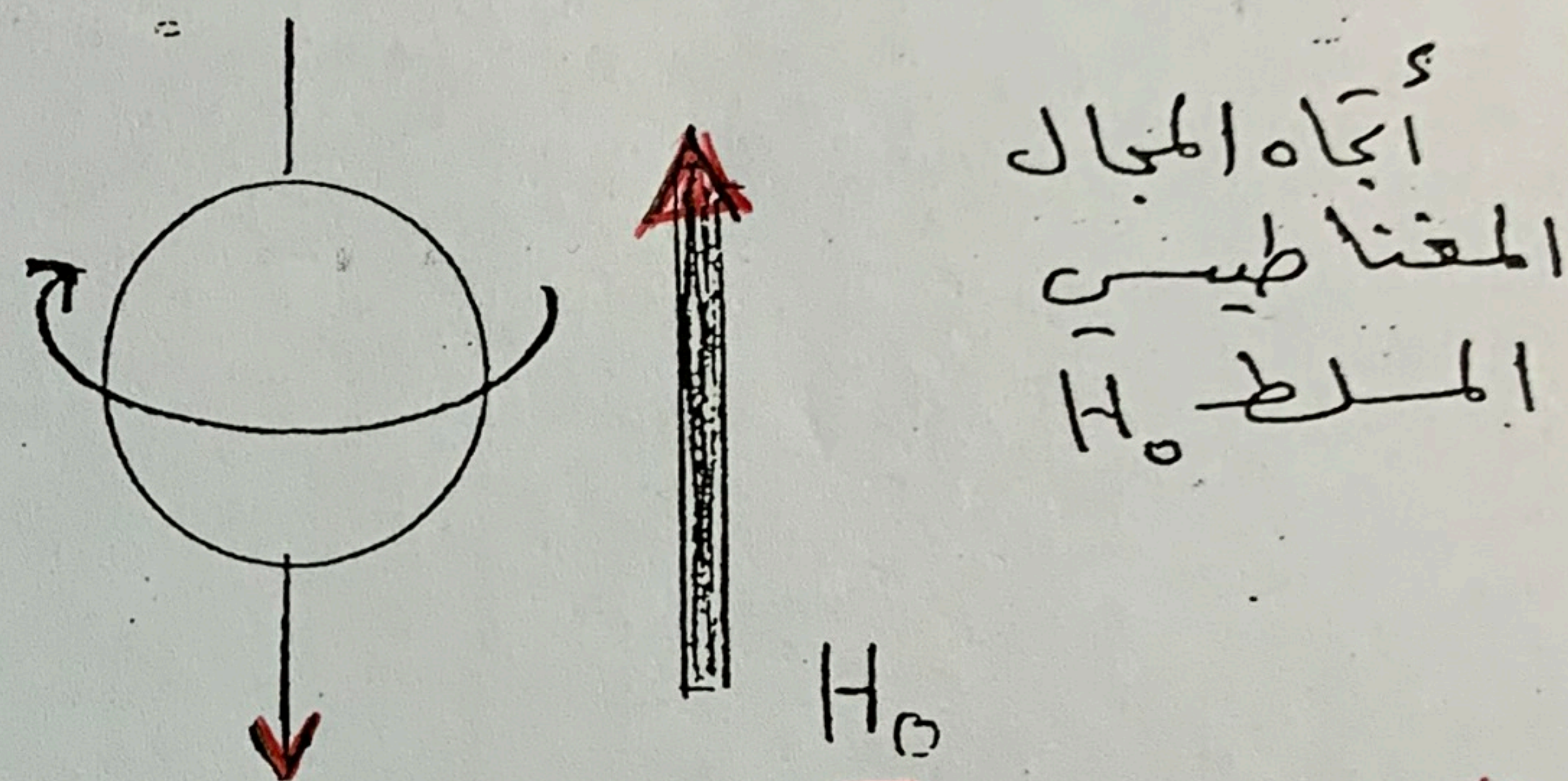
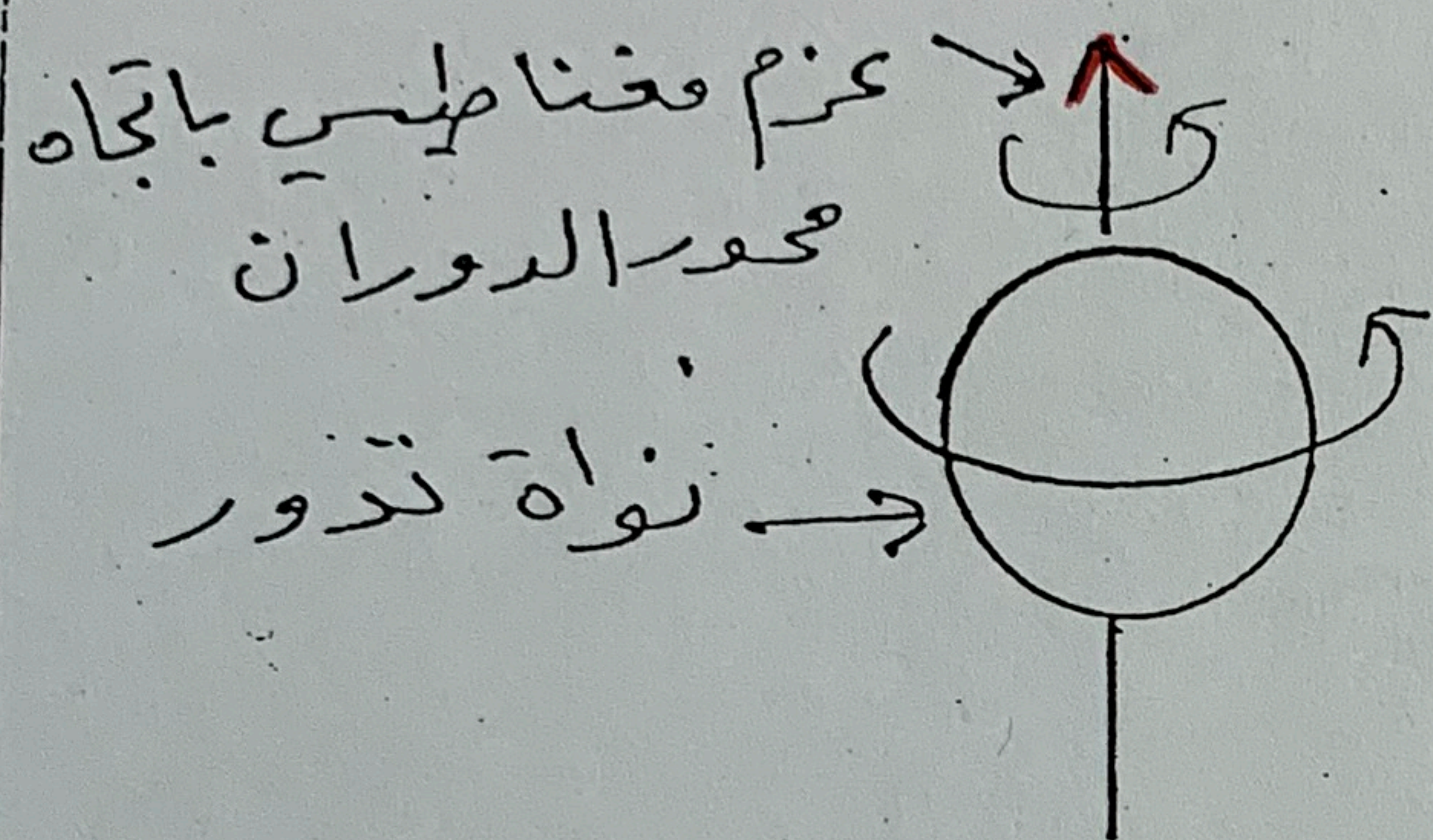
مكتبة الجامعة

①

خصائص الرنين النووي المغناطيسي

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy ^1H NMR

كما تدور الذرات فان نوى الذرات كذلك تدور وان النواة تحوي شحنة موجبة فان دورتها يولد عزم مغناطيسي باتجاه محور الدوران لذلك فانها تسلك وكأنها مغناطيس صغير، وإذا ما وضع البروتون في مجال مغناطيسي خارجي فان عزمها المغناطيسي يكون في اتجاهين، أما اتجاه مع المجال المغناطيسي المسلط أو عكسه والدول يكون أكثر استقرار وأقل طاقة. وعندما تمتص الطاقة من قبل النواة فان مغناطيسية البروتون تنقلب الى وضع أقل استقرار وبطاقة عالية وعكس المجال المسلط.



أن الطاقة اللازمة لانتقال دوران البروتون تعتمد على زيادة شدة المجال المغناطيسي المسلط وعلى زيادة التردد. لأن $\Delta E = h\nu$ والتردد يتناسب طردياً مع شدة المجال المسلط حسب المعادلة:

$$\nu = \frac{\gamma H_0}{2\pi}$$

$$\nu \propto H_0$$

ν = frequency, in cycle per second

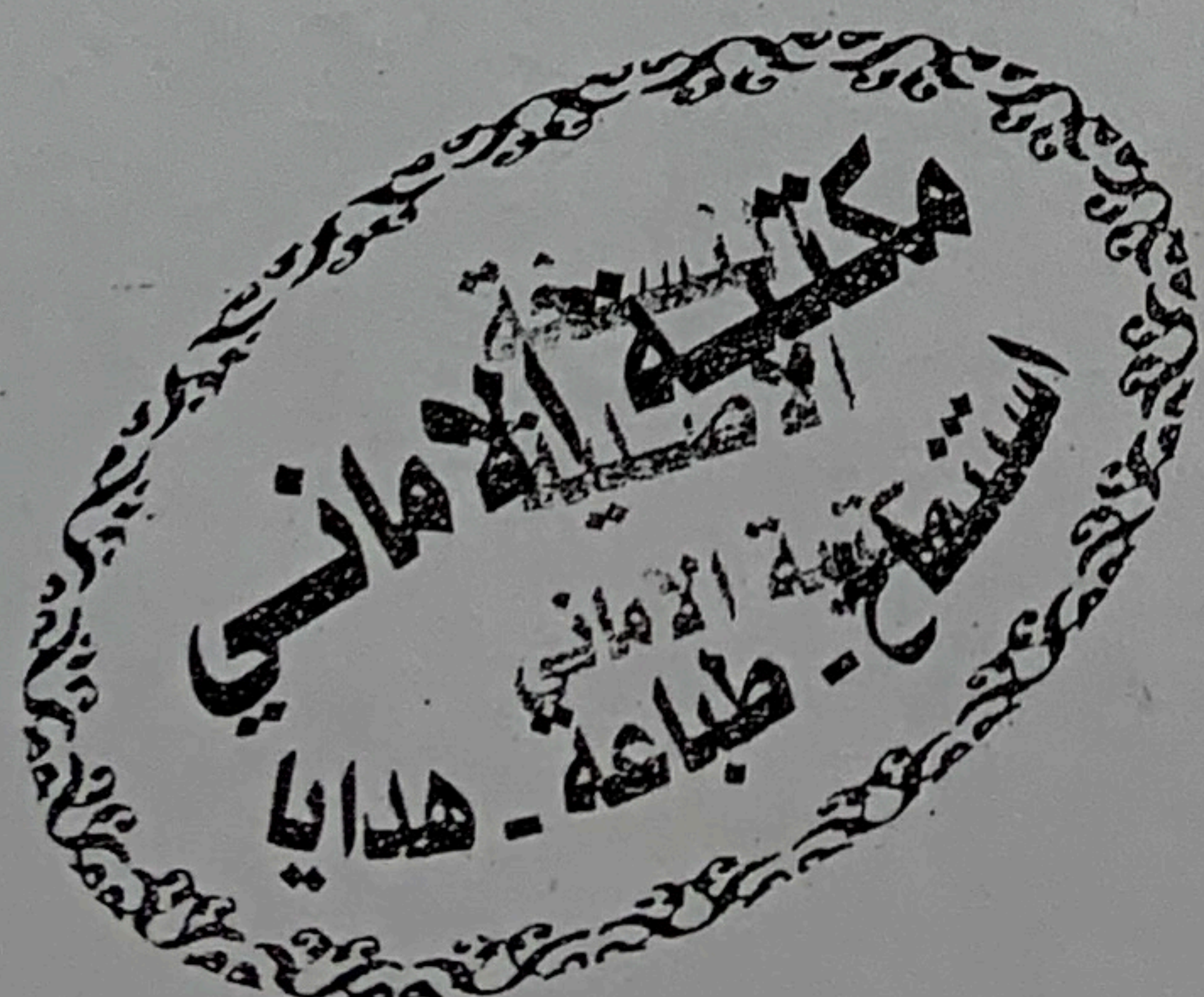
H_0 = strength of the magnetic field, in gauss

γ = a nuclear constant, the gyromagnetic ratio

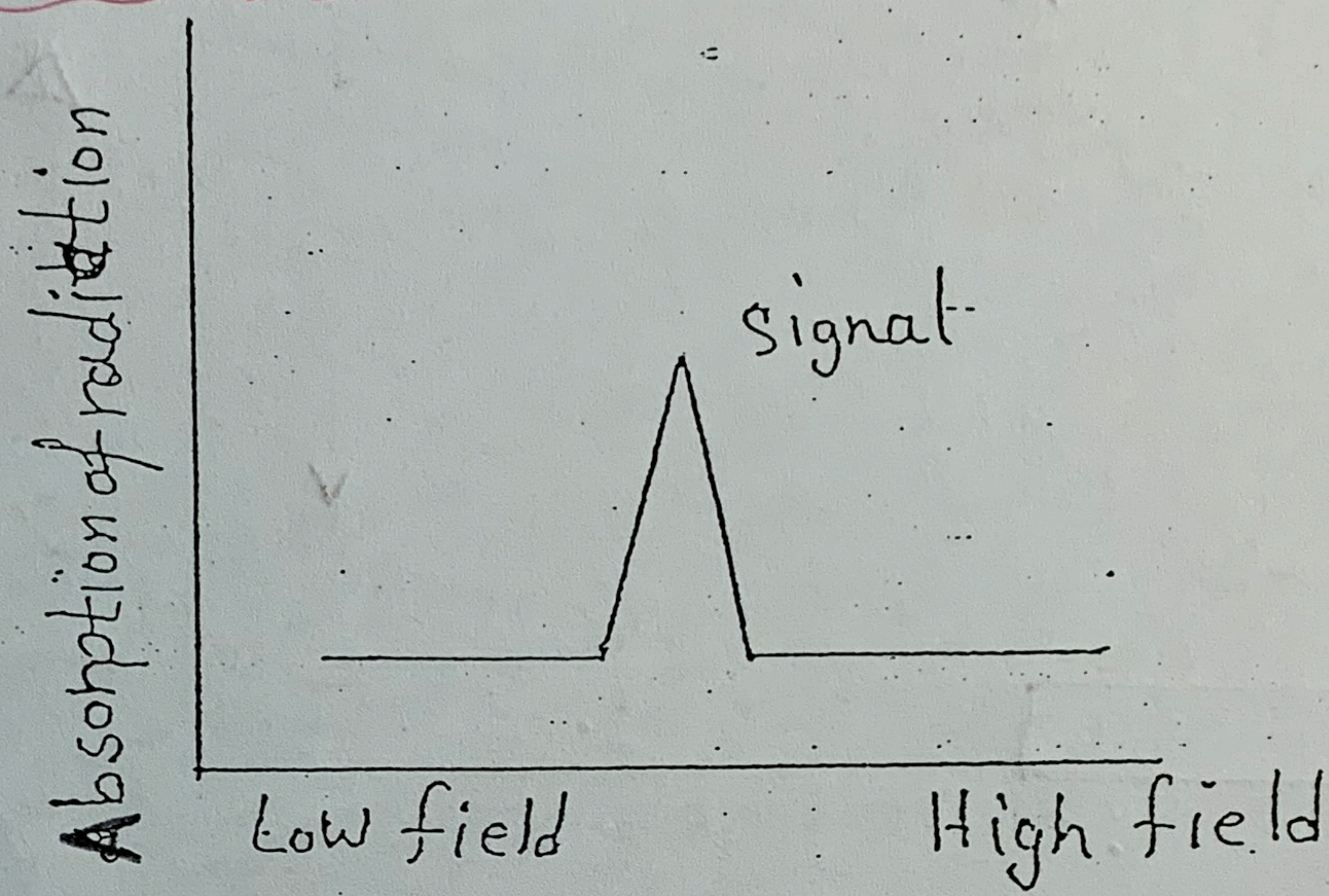
[26,750 for the proton]

في مجال مغناطيسي مقداره 14.092 gauss تكون الطاقة اللازمة لحدوث

الامتصاص ماوية لتردد مقداره 60 Mc ← 60 million cycles per second



للحصول على ملف NMR هناك طريقتان أما يتمت المجال المغناطيسي الخارجي المسلط على البروتون ونغير تردد الأشعة الراديوية بصورة تدريجية كما نحصل في ملف IR ونلاحظ التردد الذي عنده يحدث الامتصاص أو نشيئ تردد الإشعاع الراديوي ونغير هذه المجال المغناطيسي إلى أن نصل إلى هدف معين من المجال بحيث يحدث انقلاب البروتون وعندها نحصل طاقة الإشعاع التي عندها يحدث الامتصاص أو ظهور الطيف أو ظهور القمة، إن لهذا الطيف نطلق عليه طيف الرنين النووي المغناطيسي.

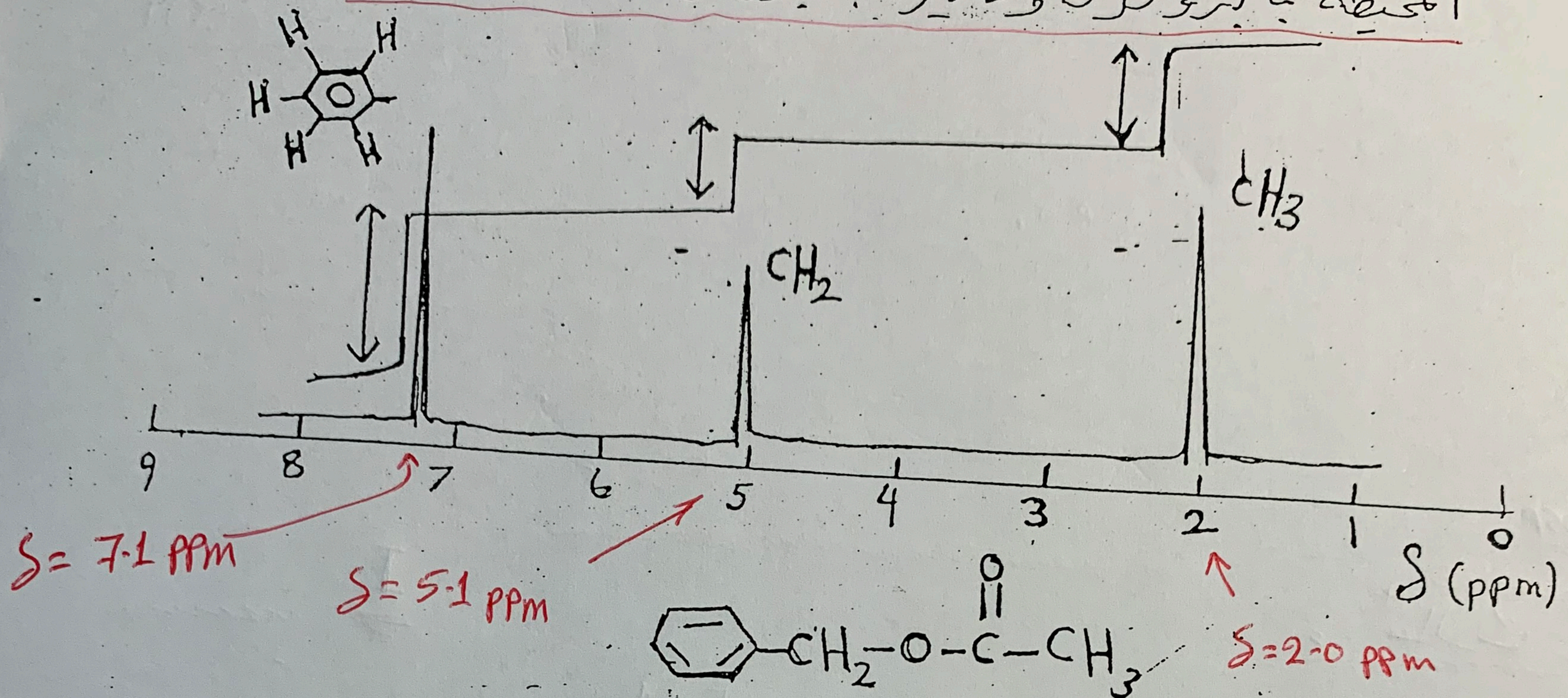


إن التردد الذي عنده يحدث الامتصاص يعتمد على المجال المغناطيسي الخاص بكل نواة وهو عند المجال المغناطيسي المسلط وإن المجال المغناطيسي الخاص بالنواة يعتمد على الظروف المحيطة بالنواة مثل الكثافة الإلكترونية المحيطة بها ونوع البروتونات المحيطة بالذرة ونوع البروتونات في كل مجموعة لذلك لا تشابه جميع البروتونات في كمية المجال المغناطيسي المسلط اللازم لحدوث الامتصاص وعمل هذا الأساس لا يظهر Signal قيمة واحدة بل عدد من القيم كل حسب نوع البروتون. لذلك نلاحظ عدد من القيم حسب نوع كل بروتون وما يحيطه من مجاميع أخرى، نحن إذاً نستطيع من طيف NMR التعرف على:

- أ - عدد القيم يزودنا بمعلومات عن الأنواع المختلفة من البروتونات في الجزيئة.
- ب - موقع القيم يزودنا بمعلومات عن الظروف الإلكترونية لكل بروتون.

⑤

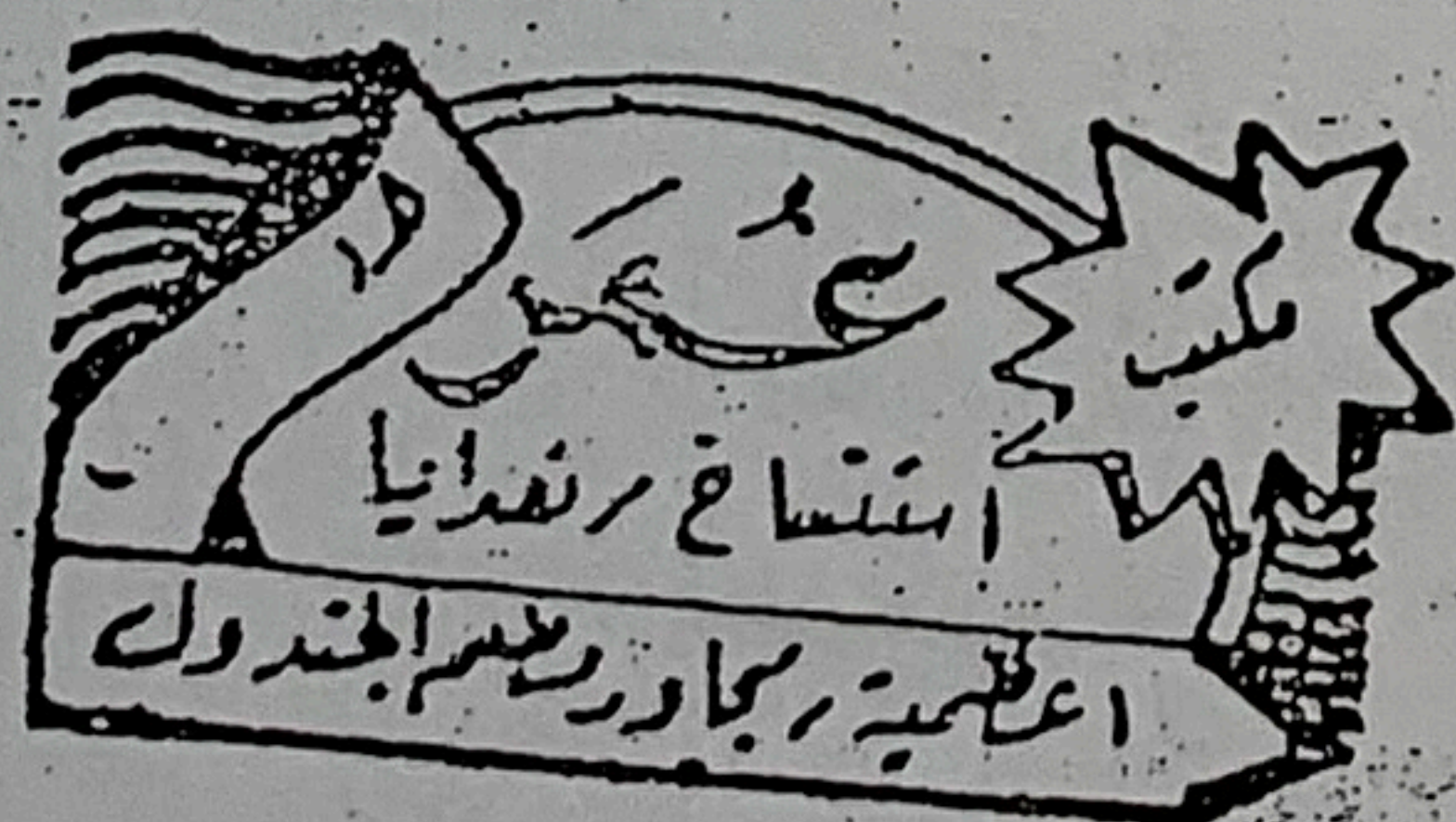
- شدة القمم تدل على عدد البروتونات في كل مجموعة.
- عدد الذرات التي تحدث في كل قمة تخبرنا بالظروف المحيطة بالبروتون وتأثيره بالبروتونات المجاورة.



Benzyl acetate

- * نلاحظ أنه رسم طبق الرنين النووي المغناطيسي لـ Benzyl acetate
- * وتبدو فيه ثلاث قمم، الأولى في موقع $\delta 2.0$ وتعود إلى بروتونات مجموعة CH₃ والثانية في موقع $\delta 5.1$ تعود إلى بروتونات مجموعة CH₂ والثالثة في موقع $\delta 7.1$ تعود إلى بروتونات حلقة البنزين الخمسة وهذه القمم تكون إرتقاءً
- * النسبي 3:2:1 أي يتناسب مع عدد البروتونات في
- * الميادين الثلاثة، وبما إن هذه القمم مفردة غير مشطبة
- * على نفسها فهذا يدل على أن البروتونات في كل مجموعة معزولة
- * عن البروتونات الأخرى.

singlet



د. صبيح طرابلس

* حالات الدوران النووي : Nuclear spin states

الدنوية التي لها عدد ذري فردي أو عدد كتلي فردي تكون لها عزم دوران زاوي مكتمل $quantized\ spin\ angular\ momentum$ ولها عزم مغناطيسي $magnetic\ moment$. ومن أمثلة النويات التي تدور أو تترن (spin) 1_1H , 2_1H , $^{13}_6C$, $^{14}_7N$, $^{16}_8O$, $^{17}_8O$, $^{19}_9F$.

بينما أنوية الذرات $^{12}_6C$, $^{16}_8O$ ليس لها عزم. ولذلك فإن عدد حالات الدوران I (Nuclear spin quantum number) وإن حالات الدوران تساوي $2I+1$ وتكون بالشكل التالي:-

$$I, (I-1), \dots, (-I+1), -I \rightarrow -I \text{ to } +I$$

فمثلاً نواة ذرة الهيدروجين لها $I = \frac{1}{2}$ ياي $\frac{1}{2}$ إذن لها حالتان للدوران $2(\frac{1}{2})+1=2$ وهما $+\frac{1}{2}$ و $-\frac{1}{2}$

أما نواة ذرة الكلور فإن قيمة $I = \frac{3}{2}$ ولها أربعة حالات للدوران $2(\frac{3}{2})+1=4$ وهما $(+\frac{3}{2}), (+\frac{1}{2}), (-\frac{1}{2}), (-\frac{3}{2})$

$$I, (I-1), \dots, (-I+1), -I \rightarrow -I \text{ to } +I$$

$$I-1 \Rightarrow \frac{3}{2} - \frac{2}{2} = \frac{1}{2}$$

$$-\frac{3}{2} + \frac{2}{2} = -\frac{1}{2}$$

والجداول التالي يوضح عدد الدوران المكتمل I لمجموعة من الانوية وكذلك حالات الدوران $2I+1$

Element	1_1H	2_1H	$^{12}_6C$	$^{13}_6C$	$^{14}_7N$	$^{16}_8O$	$^{17}_8O$	$^{19}_9F$	$^{31}_{15}P$	$^{35}_{17}Cl$
I	$\frac{1}{2}$	1	0	$\frac{1}{2}$	1	0	$\frac{5}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$
عدد حالات الدوران	2	3	0	2	3	0	6	2	2	4

$2I+1$

ماتري

تلك

حالات

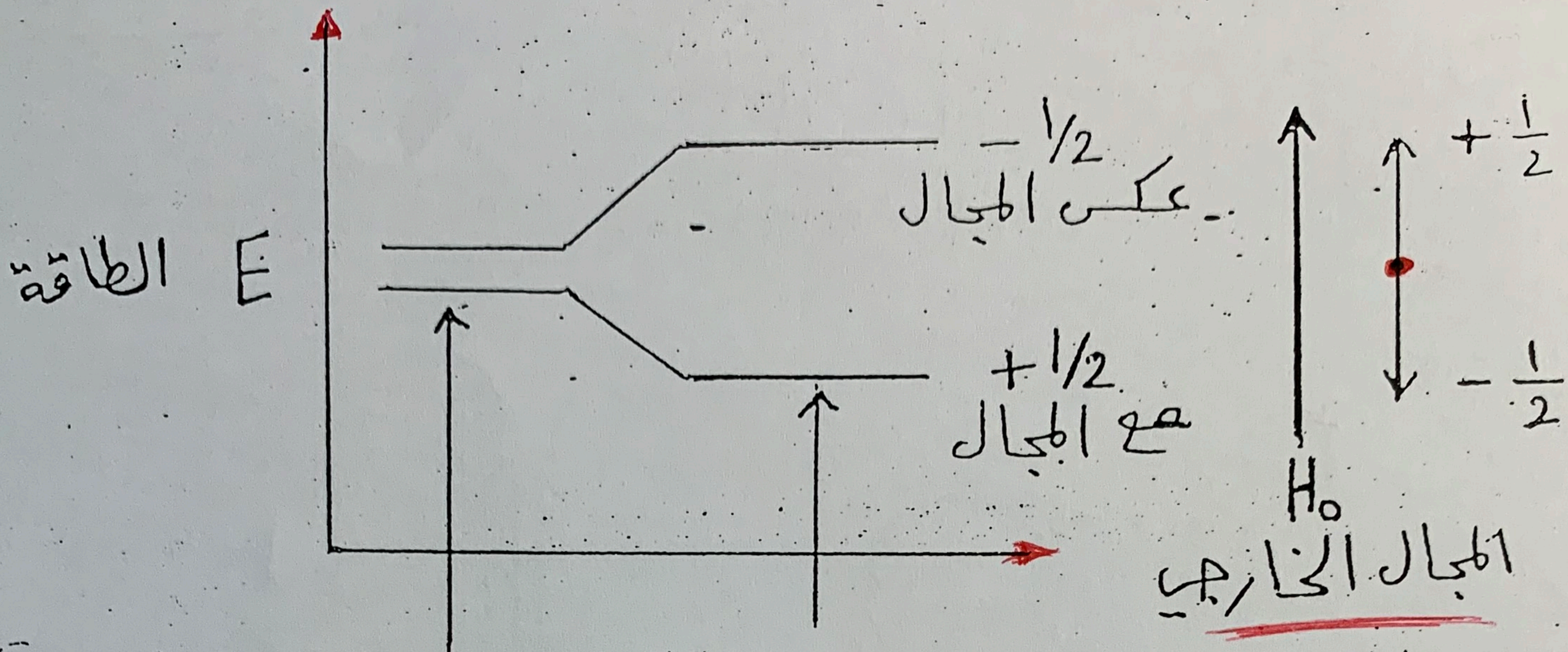
(ليس لها عزم)

ليس لها

Nospin

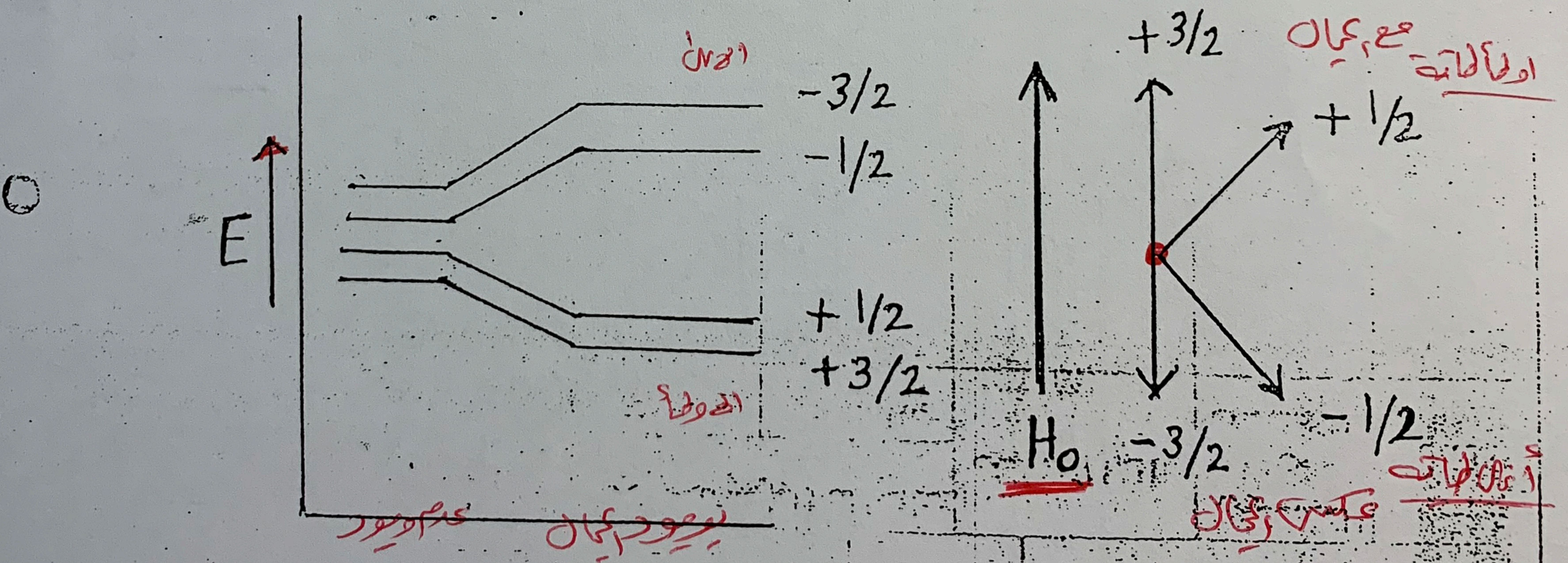
د. صباح طالب

* لذلك عند تخطيط مجال مغناطيسي خارجي فأن حالات الدوران تتفصل الى حالتين مختلفتين باضافة الشكل :-

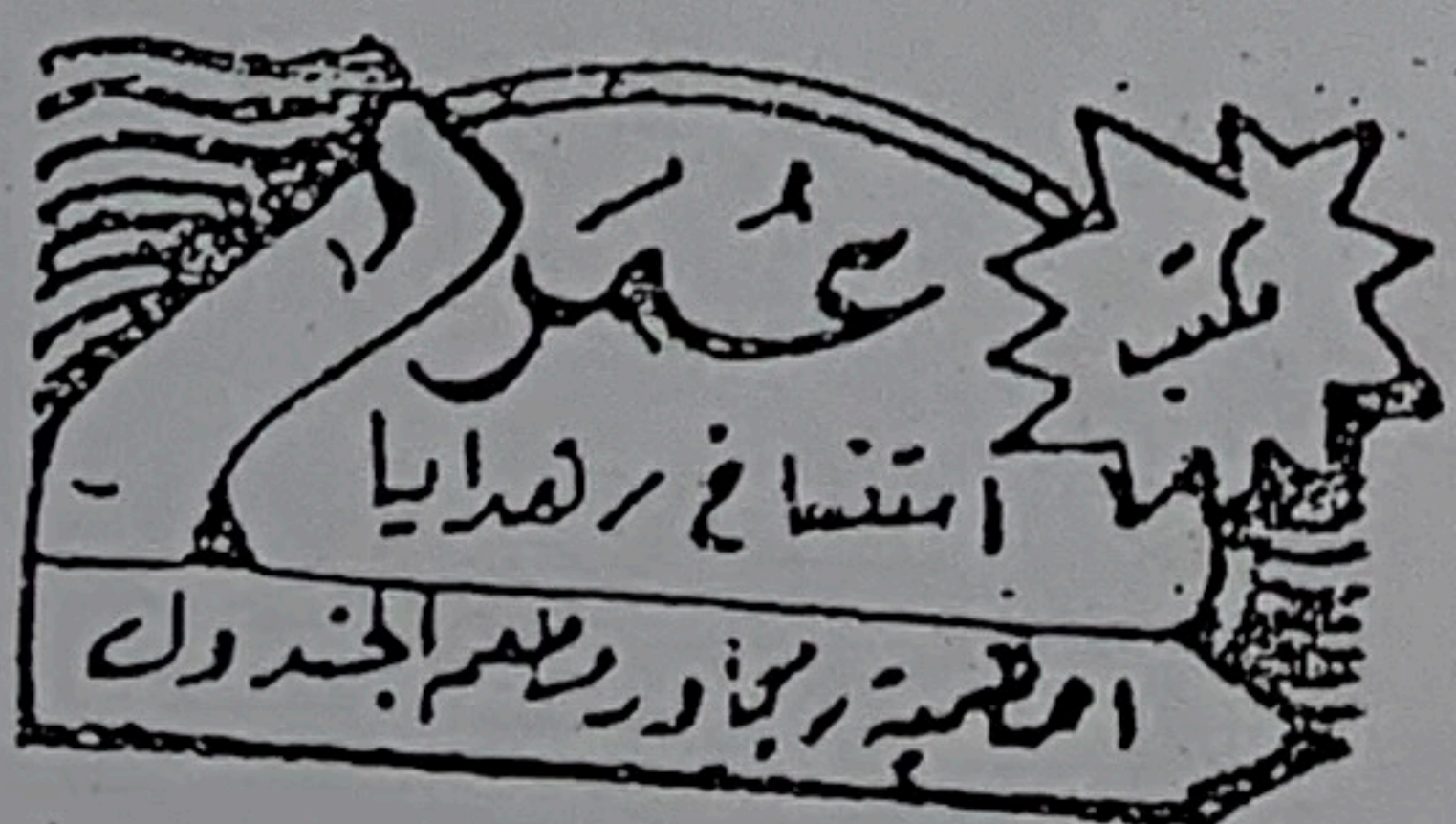


وجود المجال المغناطيسي لا يوجد مجال مغناطيسي خارجي
(الطاقة غير متساوية) (الطاقة متساوية)

* اما في حالة نواة ذرة الكلور فأن حالات الدوران تكون بالشكل التالي :-

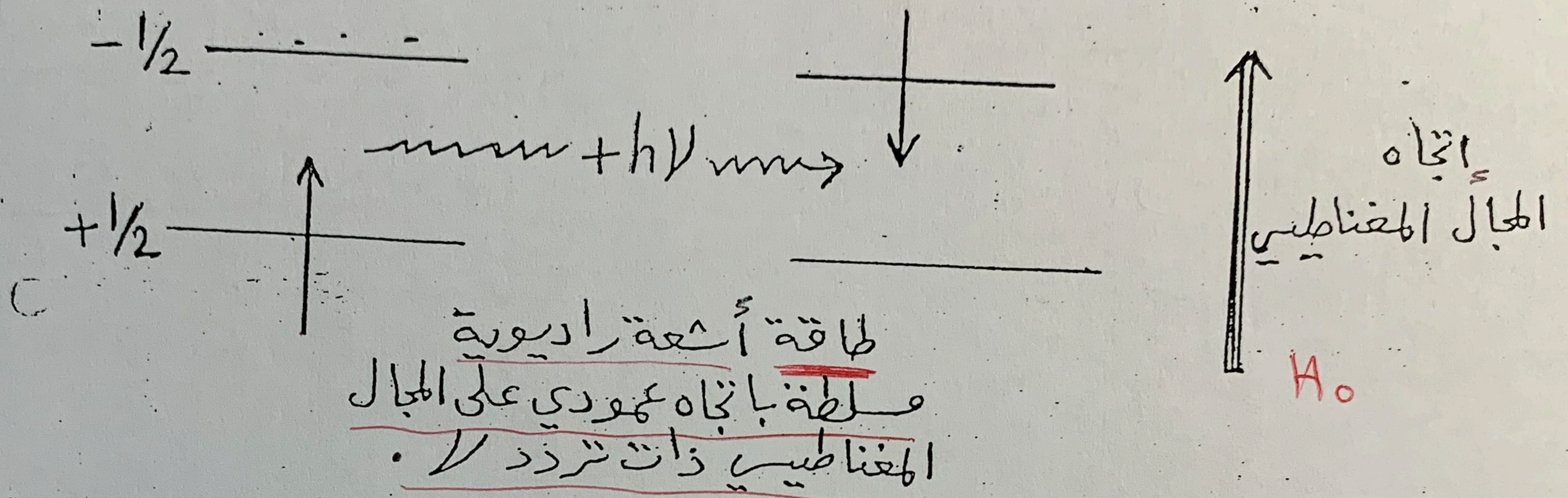


* حالات دوران نواة ذرة الكلور بوجود وعدم وجود المجال المغناطيسي المطلوب.



* امتصاص الطاقة :- Absorption of Energy

ظاهرة الرنين النووي المغناطيسي تظهر عندما تمتص النواة الطاقة بحيث يتغير دورانها ويتغير العزم المغناطيسي عكس المجال المغناطيسي المسلط.



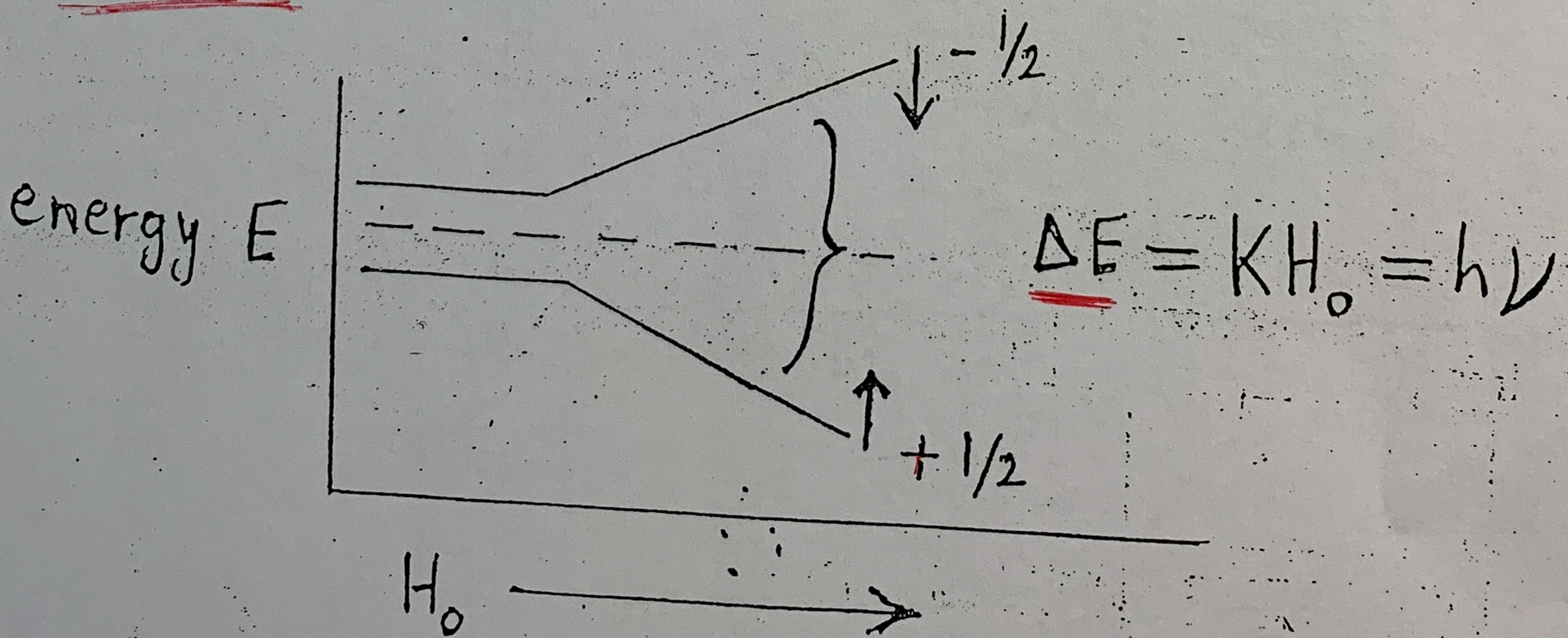
The NMR Absorption process for a proton

* مقدار الطاقة الممتصة تساوي الفرق بين الحالتين :-

$$E = (E_{-1/2} - E_{+1/2}) = h\nu$$

الطاقة الممتصة

$$\Delta E = h\nu$$



زيادة المجال المغناطيسي
* عند التكرار هذه نلاحظ اعتماد الفرق في الطاقة على قوة المجال المغناطيسي المسلط فكلما زاد المجال زاد الفرق بين الحالتين.

د. صباغ طالب

①

$$\Delta E = f(\gamma H_0) = h\nu$$

وان مقدار الفرق في الطاقة يعتمد كذلك على نوع النواة مثل (C و H) كل واحدة لها ثابتة وهي الجاير ومغناطيسية

وهي النسبة بين العزم المغناطيسي (نتيجة دوران الشحنة) والعزم الزاوي (نتيجة دوران كتلة النواة). لكل ذرة كتلة وشحنة

فاصلة بها وتختلف عن الاخرى، ان النسبة γ magnetogyric ratio ثابتة للنواة وهي تستخدم لحساب الطاقة بالاعتماد على المجال. ولما كان العزم الزاوي له قيمة عكسية بالوحدة

تكون المعادلة أعلاه :-

$$\frac{h}{2\pi}$$

$$\Delta E = \gamma \left(\frac{h}{2\pi} \right) H_0 = h\nu$$

نحل المعادلة بالنسبة للتردد للطاقة الممتصة :-

$$\nu = \frac{\gamma}{2\pi} H_0$$

لماذا عوضت القيمة الحقيقية لـ γ للبروتون في المعادلة اعلاه

لأن البروتون بحجم ان يمتص اشعاع له تردد 60 MHz في مجال شدته 14,000 Gauss. الجدول التالي يوضح شدة

المجال المغناطيسية والترددات التي عندها تردد من الانوية تعطى رنين، أي تمتص الطاقة وتحدث انتقالات

Isotope	Field strength (H ₀)	Frequency (ν)
---------	----------------------------------	---------------

¹H

10,000 Gauss

42,6 MHz

14,100

60,0

23,500

100,0

51,480

220,0

²H

10,000

6.5

¹³C

10,000

10.7

¹⁹F

10,000

40.0

³⁵Cl

10,000

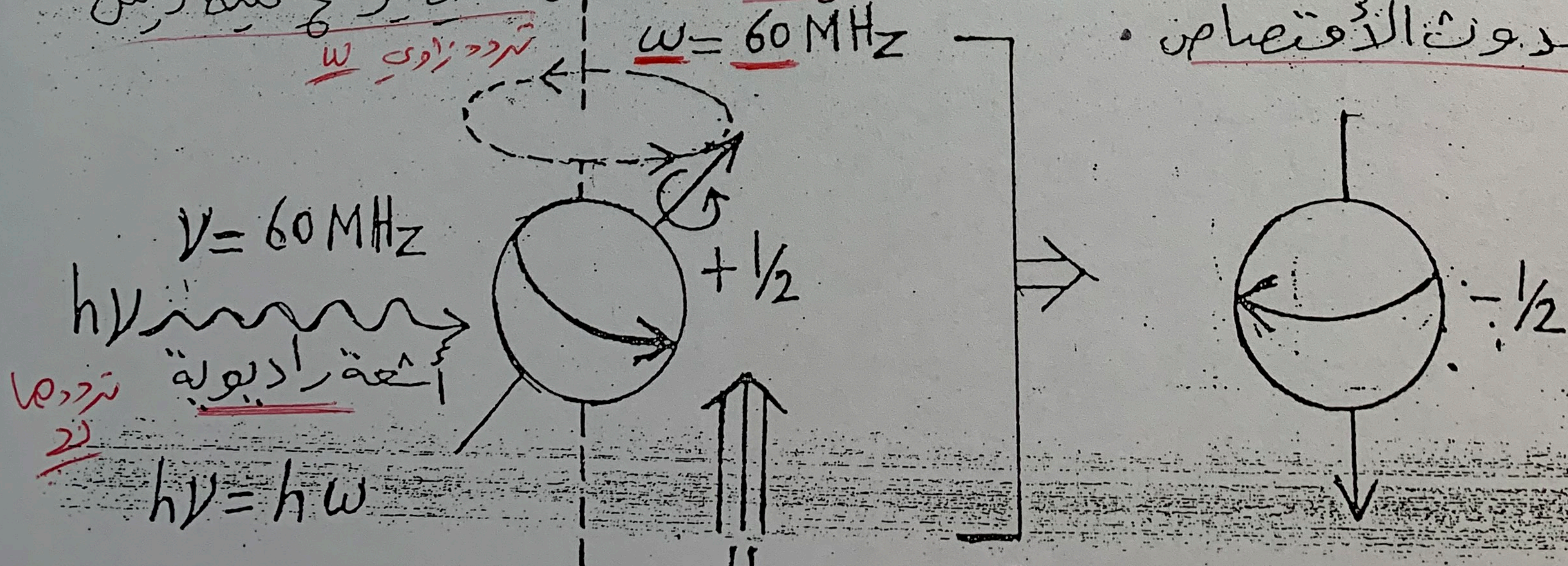
4.2

د. صديق طرابلس

إذا كانت قوة المجال المغناطيسي المسلط على البروتون 14.00 كابل
 فان الفرق في الطاقة بين حالتين الدوران تكون هو $5.72 \times 10^{-6} \text{ Kcal/mole}$ وهذا ما يعادل تردد مقداره 60 MHz أي $(60,000,000 \text{ Hz})$ أي في منطقة الأشعة الراديوية
 أنا بقية الدورية فانها تختلف من نواة ذرة المصدر وبعيد
 في مقدار الفرق في الطاقة.
 ميكانيكية امتصاص الطاقة (الرنين)

The mechanism of Absorption (Resonance)

عندما يسلط مجال مغناطيسي خارجي على البروتونات فانها سوف تدور حول محورها بتردد زاوي (ω) والذي يتناسب مع شدة المجال بصورة طردية. فلو فرضنا ان شدة المجال 14.1 Gauss عندها تكون التردد الزاوي 60 MHz وهذا يعني ان المجال الكهربائي المتذبذب الناتج من الدوران له نفس التردد وعند تسليط أشعة راديوية بحدود عمودية على اتجاه المجال المغناطيسي الخارجي وب نفس التردد 60 MHz على البروتون وهو في حالة دوران فان الطاقة سوف تمتص لانه سيحدث انزياح في التردد
 تردد المركبة الكهربائية المتذبذبة للأشعة الراديوية وتردد المجال الكهربائي الناشئ من دوران البروتون فتصبح الطاقة في المظهر وعندها تمتص هذه الطاقة وحدث تغير في الدوران أي حدث عملية الرنين. والشكل التالي يوضح عملية الرنين وحدوث الانقصاص.



H_0 14.100 Gauss

الرنين النووي المغناطيسي: امتصاص الطاقة يحدث عندما $\nu = \omega$