طیف سنجی رزونانس مغنایسی هسته

Nuclear Magnetic Resonance (NMR)

طیف سنجی رزنانسی مغناطیسی هسته NMR (Nuclear Magnetic Resonance)و رزونانس اسپین الکترون (Electron Spin Resonance, ESR)ایندو صرفاً در حضور میدان های مغناطیسی مورد استفاده قرار می گیرند و جزء روشهای غیر اپتیکی هستند.

NMR جز بهترین روشهای طیف سنجی است زیرا اطلاعاتی که بدست می دهد نسبت IR وuv-vis بیشتر است و پارامتر های زیادی را در اختیار قرار می دهد.

δ: chemical shift
j: coupling constant
T1,T2: relaxation time اطلا عات در مورد دینامیک می دهند.

تفاوتهای عمده روشهای اپتیکی با روشهای مغناطیسی :

این دو روش بدون حضور میدان مغناطیسی قابل بررسی نیستند باید در هر دو دستگاه، از یک میدان مغناطیسی قوی و ثابت استفاده شود.

تفاوت ترازهای انرژی در ESR و به ویژه در NMRخیلی خیلی کوچکتر از روشهای اپتیکی حتی نزدیک تر از ترازهای چرخشی است. $\frac{1}{2}KT > \Delta E$
در طیف سنجیهای اپتیکی همیشه در مولکول یا اتمهای جسم حالت غیر ترازی وجود دارد . زیرا تفاوت بین ترازهای انرژی زیاد است. اما در NMR تمامی هسته های موجود در نمونه در یک تراز هستند .لذا برای از بین بردن هم ترازی باید از یک میدان مغناطیسی استفاده کرد.
هسته های فعال مغناطیسی در حضور میدان مغناطیسی به ۲ یا چندین تراز تقسم می گردد.

هسته های فعال مغناطیسی :
هسته هایی در NMRدارای جذبند که عدد کوانتوم اسپین آنها مخالف صفر باشد. $I \neq 0$
درESR فقط گونه هایی که دارای الکترون فرد باشند فعال هستند.

گرچه هنوز به لحاظ تئوری مشخص نیست که اعداد کوانتوم اسپین هسته های از ترکیب برداری اسپین پرتونها و نترونها چگونه بدست می آید . اما تجربیات نشان می دهد که این عدد به عدد اتمی و عدد جرمی بستگی دارد

اگر p,n هر دو زوج باشند در این صورت I صفراست.
اگر p,n هر دو فرد باشند در این صورت I یک عدد صحیح است.
وقتی n یاp فرد باشد در این صورت ایک عدد کسری است.

Atomic number	Mass number	I	Example
even	Even	0	C_6^{12}, O_8^{16} ,Ca_{20}^{40}
Even or odd	Odd	n/2	H_1^1(I=½), O_8^{17}(I=⅔), Na_{11}^{23}(I=⅔), N_7^{15}(I=½)
Odd	Even	n	B_5^{10}(I=3),H_1^1(I=1),N_7^{14}(I=1)

بررسی NMRبه لحاظ تئوری :

این روش غالباً بصورت جذبی مانند روش IR اندازه گیری می شود. برای تعیین فرکانس امپدانس و برای تعیین ترازهای انرژی باید از مدلها مکانیک کوانتومی و کلاسیک استفاده کرد.

مدل مکانیک کوانتومی :

هسته های مغناطیسی چون دارای بار هستند و همچنین دارای چرخشند بصورت مگنت ریزعمل کرده و دارای میدان مغناطیسی ظریفند. برای بررسی NMR در این مدل، باید چرخش هسته ها را در حضور میدان مغناطیسی خارجی بررسی کرد.

از حل معادلات موج به معادله ای می رسند که انرژی هر تراز را به این صورت مشخص می کند.

$$E = -\frac{m\mu}{I}\beta H_0$$

m=عدد کوانتم مغناطیسی
μ= ممان مغناطیسی هسته
β = مگنتون هسته (ثابت) همان مغناطیس را برحسب βبیان می کند.
H^o= شدت میدان مغناطیسی خارجی برحسب گوس.
I= عدد کوانتوم اسپین

تعداد ترازهای انرژی کوانتوم مغناطیسی که در حضور یک میدان برای هر هسته ایجاد می شود برابر است با $(2I+1)$.

برای $H_1^1, C_6^{13}, F_5^{19}$ $I=(½)$ است پس تعداد ترازهای انرژی برای کلیه این هسته ها با ½=ابرابر با ۲ است.