

انرژی هسته در میدان مغناطیسی

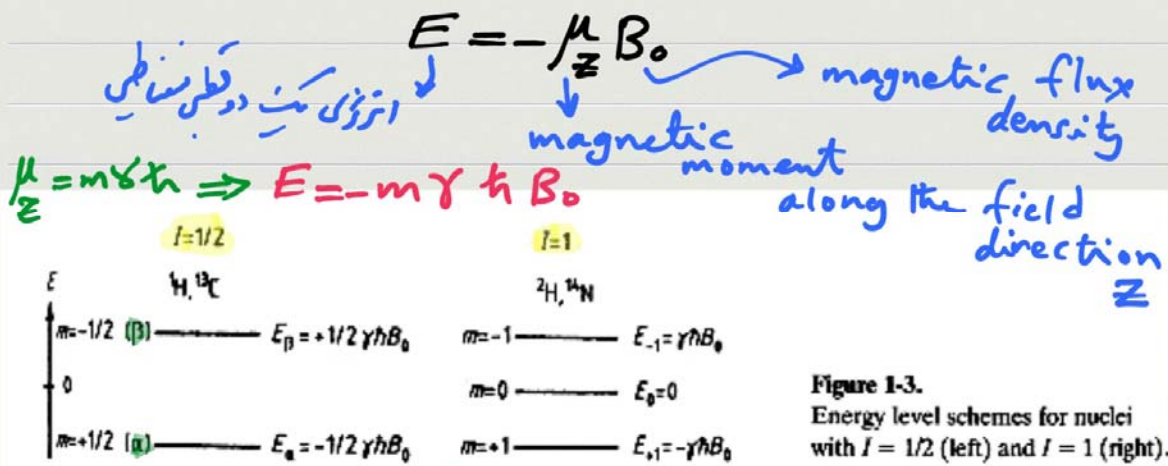


Figure 1-3.
Energy level schemes for nuclei with $I = 1/2$ (left) and $I = 1$ (right).

Zeeman Levels

(2I + 1) energy states

اختلاف انرژی بین دو سطح مجاور :

$I = 1/2$

$$\Delta E = E_\beta - E_\alpha = \frac{1}{2} \gamma \hbar B_0 - (-\frac{1}{2} \gamma \hbar B_0) = \gamma \hbar B_0$$

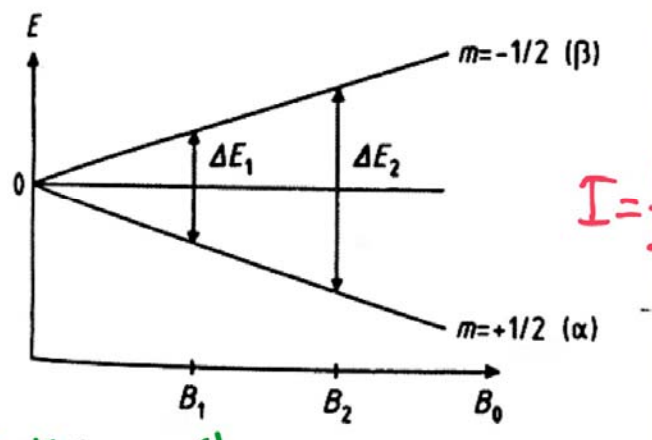
$I = 1$

$$\Delta E = E_0 - E_{+1} = 0 - (-\gamma \hbar B_0) = \gamma \hbar B_0$$

ΔE تناسب مستقیم با B_0 دارد

- ^1H
- ^{13}C
- ^{19}F
- ^{31}P
- ^{57}Fe
- ^{195}Pt

$$\Delta E = \gamma \hbar B_0$$



$$I = \frac{1}{2}$$

اختلاف انرژی دو سطح مجاور (سطح زمینی) به میزان تابعی از چگالی میدان است

populations of the Energy Levels Boltzmann statistics

For nuclei with $I = \frac{1}{2}$:

$$\frac{N_\beta}{N_\alpha} = e^{-\Delta E/k_B T} \approx 1 - \frac{\Delta E}{k_B T} = 1 - \frac{\gamma \hbar B_0}{k_B T}$$

تعداد هسته در سطح انرژی بالاتر

اختلاف انرژی دو سطح

دما (K)

تعداد هسته با سطح انرژی پایین تر

ثابت بولتزمن
 $1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

برای H و سایر هسته ها، ΔE در مقایسه با $k_B T$ (حرکت گرمایی) بسیار کوچک است. در نتیجه تعداد جمعیت در سطح انرژی تقریباً برابر است.

تفاوت جمعیت دو سطح انرژی در حد "تکت در میلیون" است
(ppm)

مثال -

¹H

$$B_0 = 1.41 \text{ T (resonance frequency} = 60 \text{ MHz)}$$

$$T = 300 \text{ K}$$

$$\Delta E = \gamma \hbar B_0$$

$$\Delta E = 26.7522 \times 10^{-7} \text{ rad T}^{-1} \text{ s}^{-1} \times \frac{6.6256 \times 10^{-34} \text{ Js}}{2 \times 3.14} \times 1.41 \text{ T}$$

$$\Delta E \approx 2.4 \times 10^{-2} \text{ J mol}^{-1} \approx 0.6 \times 10^{-2} \text{ cal mol}^{-1}$$

$$\frac{N_\beta}{N_\alpha} = 1 - \frac{\Delta E}{k_B T} = 1 - \frac{2.4 \times 10^{-2} \text{ J mol}^{-1}}{1.3805 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \times 300 \text{ K}}$$

$$N_\beta \approx 0.9999904 N_\alpha$$

For $B_0 = 7.05 \text{ T}$ (300 MHz):

$$N_\beta = 0.99995 N_\alpha$$

$$I = \frac{1}{2}$$

ن⁹
H, ¹³C

بگذار M_0 نقش
لای در توصیف آمای

تجربیات NMR

پالسی دارد.

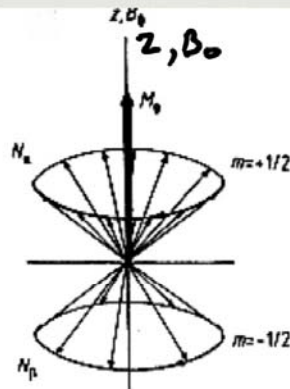


Figure 1-5. Distribution of the precessing nuclear dipoles (total number $N = N_\alpha + N_\beta$) around the double cone. As $N_\alpha > N_\beta$ there is a resultant macroscopic magnetization M_0 .

با جمع کردن مرکزها های z

مانند صفحاتی هسته در یک صفحه یک

Macroscopic Magnetization

در جهت M_0

خواهم درست
زیرا N_α بیشتر از N_β است

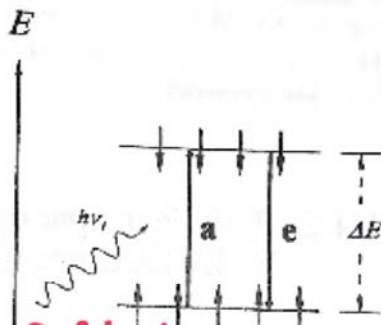


Figure 1-6. Energy level scheme for a system of nuclei with spin $I = 1/2$. Irradiation with the frequency ν_1 such that $h\nu_1 = \Delta E$ induces absorption (a) and emission (e) transitions.

The Resonance Condition

$$\Delta E = \gamma \hbar B_0$$

$$\Delta E = h\nu_1$$

$$\gamma \frac{\hbar}{2\pi} B_0 = h\nu_1$$

$$\nu_L = \nu_1 = \left| \frac{\gamma}{2\pi} \right| B_0$$

• اگر جهت های سطح انرژی N_α و N_β یکسان باشد، جذب بیشتر ملاحظه می شود و سگنالی مشاهده نمی شود

$$N_\alpha = N_\beta \quad \text{Saturation}$$

• رزونانس موقتی رخ می دهد که فرکانس تابش اکترومغناطی با فرکانس لارمور برابر باشد

$$\nu_L = \nu_1 = \left| \frac{\gamma}{2\pi} \right| B_0$$

برای هسته هایی با مقادیر اسپین مختلف انتقالها به شرطی مجاز هستند که تغییر عدد کوانتومی مغناطیسی در ضمن انتقال برابر با یک باشد

$$\Delta m = \pm 1$$

یعنی

Single quantum transitions are allowed
 این تنها انتقال بین سطوح انرژی می باشد
 لجه عمود بر آن می دهد و مجاز است

$\Delta m = \pm 1$ single quantum transitions مجاز
 (مثلاً از $m = \frac{1}{2}$ به $m = -\frac{1}{2}$)

$\Delta m = 0$ Zero " " غیر مجاز
 (مثلاً انتقال از $m = +1$ به $m = -1$ درسته نه غیر مجاز است)
 $\Delta m = 2$ double " " غیر مجاز

در سیستم های کو در آرنای ضد هسته دارای اسپین با هم کوپل می شوند دیده می شود
 $\alpha\alpha \rightarrow \beta\beta \quad \Delta m = 2$
 $\alpha\beta \rightarrow \beta\alpha \quad \Delta m = 0$