



الكيمياء

التحليل الطيفي باستخدام طيف الرنين النووي المغناطيسي

2024 / 2023 م

م 1

مطياف الرنين النووي المغناطيس Nuclear Magnetic Resonance (NMR)

مقدمة:

تعد ظاهرة الرنين النووي المغناطيسي (NMR) Nuclear magnetic resonance إحدى الظواهر الفيزيائية التي تعتمد على الخواص المغناطيسية الميكانيكية الكمية لنواة الذرة. ويستخدم الرنين النووي المغناطيسي للدلالة على مجموعة منهجيات وتقنيات علمية. وتستخدم هذه الظاهرة لدراسة الجزيئات من حيث البنية و التشكيل الفراغي.

وتعتمد الظاهرة أساسا على أن جميع الأنوية الذرية التي تملك عددا فرديا من البروتونات أو النيوترونات يكون لها عزم مغناطيسي أصلي $intrinsic$ وعزم زاوي $angular momentum$ ، وأكثر الأنوية التي تستخدم في هذه التقنيات هي نواة ذرة الهيدروجين H^1 وهي أكثر نظائر الهيدروجين توافرا في الطبيعة ، وكذلك نواة ذرة الكربون-13. وهناك نظائر عناصر أخرى يمكن أن تستخدم لكن استخداماتها تبقى أقل.

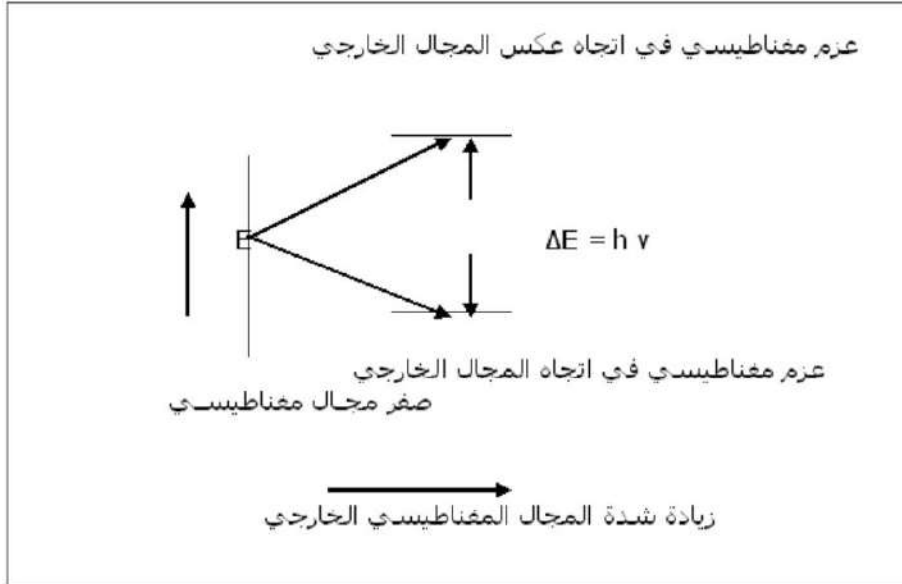
وينتج عن الدوران المغزلي $spining motion$ لأنوية هذه العناصر حول محورها عزم مغناطيسي (M) $magnetic moment$ ، وعند وضع هذه الأنوية بين قطبي مجال مغناطيسي خارجي ، فإنه يحدث تأثير على مستويات الطاقة الخاصة بالحركة المغزلية $spin energy level$ لهذه الأنوية ، مما يؤدي الى إنفصال $splitting$ طاقة الحركة المغزلية إلى مستويين طاقيين مختلفين على أساس اتجاه العزم المغناطيسي الناشئ عن الحركة المغزلية وهما:-

- مستوى طاقي منخفض $Low energy level$ وهنا يكون العزم المغناطيسي في اتجاه المجال المغناطيسي الخارجي.
 - مستوى طاقي مرتفع $High energy level$ وهنا يكون العزم المغناطيسي في اتجاه مضاد للمجال المغناطيسي الخارجي.
- ويمكن زيادة الفرق في الطاقة بين هذين المستويين بزيادة شدة المجال المغناطيسي الخارجي - كما سيتضح في شكل (6-1) - ولذلك توضع هذه الأنوية في مجال

مطياف الرنين النووي المغناطيسي

مغناطيسي خارجي (بين قطبي مغناطيس كبير) ويسلط عليها أشعة الراديو Radiowave ، فتمتص هذه الأنوية طاقة أشعة الراديو وتنتقل إلى مستوى الطاقة الأعلى ، وينتج عن ذلك تغير في اتجاه الحركة المغزلية للنواة ، ثم ترجع الأنوية من المستوى العالي في الطاقة إلى المستوى المنخفض مرة أخرى وهكذا ، ويطلق على هذه الظاهرة ظاهرة الرنين النووي المغناطيسي. وإمتصاص الطاقة يمكن الكشف عنه وتكبيره كطيف خطي ويطلق عليه إشارة الرنين المغناطيسي resonance signal

ويظهر كل جزئ عدة إمتصاصات تعبر عن الظروف الأليكترونية المحيطة بكل نواة والتي تحدد نوع الرابطة والذرات الأخرى المرتبطة بهذه النواة ، ولذلك يستخدم تحليل الرنين النووي المغناطيسي في التعرف على التركيب البنائي للجزيئات.



شكل (1-6): طاقة الحركة المغزلية

ويعبر عن طيف الأشعة الكهرومغناطيسية في منطقة أشعة الراديو بالتردد بوحدات هرتز ، ميغاهيرتز (1MHz = 10^6 Hz), MHz, Hertz (Hz)

مطياف الرنين النووي المغناطيسي

ويوجد عدد محدود من العناصر التي تحتوي على أنوية ذات خواص مغناطيسية قوية تتيح التطبيق العملي لإمكانية تحليلها بواسطة مطياف NMR - كما ذكرنا - مثل: الهيدروجين ^1H ، والكربون ^{13}C بالإضافة الى بعض العناصر الأخرى ، مثل: البورون ^{11}B ، والفلور ^{19}F ، والفوسفور ^{31}P . وهذه العناصر تتميز أيضاً بأن ذراتها تحتوي على عدد فردي odd number من البروتونات أو النيوترونات ، لها رقم كم مغزلي Spin (Quantum Number) يساوى $\frac{1}{2}$.

ويكون عدد الاتجاهات المحتملة للعزم المغناطيسي = 2

ويمكن حساب طاقة المستويات الناتجة عن الإتجاهات المختلفة للعزم المغناطيسي بواسطة المعادلة التالية:

$$E = - m \mu B_0 / I$$

حيث أن:

E هي طاقة المستوى

B_0 شدة المجال المغناطيسي الخارجى

m رقم الكم المغناطيسي : $m=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm \ell$ مثال: عندما ($\ell=2$) فإن m تملك خمس قيم هي: $2, +1, 0, -1, -2$

I رقم الكم المغزلي $+\frac{1}{2}$ $-\frac{1}{2}$

μ العزم المغناطيسي.

ويوضح جدول (1-6) التالي حالة البروتونات والنيوترونات ، وكذا الدوران المغزلي لبعض الأنوية. كما يتضح من الجدول أن الدوران المغزلي لكل من الهيدروجين-1 والفوسفور-31 والفلور-19 والكربون-13 يساوي $\frac{1}{2}$

جدول (1-6): الدوران المغزلي لبعض الأنوية.

Number of protons	Number of neutrons	Spin number	Examples
Even	Even	0	^{12}C , ^{16}O , ^{32}S
Odd	Even	$1/2$	^1H , ^{31}P , ^{15}N , ^{19}F
Even	Odd	$1/2$	^{13}C
Odd	Odd	1	^4H , ^{15}N
Odd	Even	$3/2$	^{11}B , ^{79}Br
Even	Odd	$5/2$	^{127}I

وفي حالة الأنوية التي يكون فيها عدد البروتونات والنيوترونات زوجي ، تكون حركتها مغزلية في اتجاه واحد ، وبذلك يكون رقم الكوانتم المغزلي لها يساوي صفراً .

وفي حالة الأنوية التي يكون فيها عدد البروتونات أو النيوترونات فردي ، فتكون حركتها المغزلية في اتجاهين ، ويكون رقم الكوانتم المغزلي لها يساوي $1/2$.

أما في غياب المجال المغناطيسي الخارجي ، فإن العزم المغناطيسي لهذه الأنوية يمكن أن يوجد في أي اتجاه ، وتكون طاقة هذه الاتجاهات متساوية ، و عدد الأنوية (البروتونات) الموجودة في هذه المستويات متساوية أيضاً .

وأما في وجود المجال المغناطيسي الخارجي ، فإن طاقة الحركة المغزلية تنفصل الى مستويين: أحدهما ، عالي والآخر ، منخفض في الطاقة - كما سبق وشرحنا - ولذلك نجد أن هذه الأنوية تحت هذه الظروف توجه نفسها بحيث يكون اتجاه العزم المغناطيسي لها في اتجاه المجال المغناطيسي الخارجي ، لتكون عند مستوى طاقي منخفض وتظل بعض الأنوية عكس اتجاه المجال المغناطيسي الخارجي وتتناوب هذه الأنوية بحيث تغير اتجاهها لتصبح كل منها مرة في اتجاه المجال ومرة عكس اتجاه المجال - كما واضح في- (شكل 2-6).

ودائماً يكون المستوى المنخفض في الطاقة ($m=1/2$) مشغول بعدد أكبر من البروتونات عن المستوى المرتفع في الطاقة ($m=-1/2$) لأن كل نظام يميل الى التواجد في المستوى الطاقي المنخفض.