

NMR的原理和使用说明





原理

核磁共振波谱（NMR）是指位于**外磁场**中的原子核吸收**电磁波**后从一个**自旋能级跃迁**到另一个自旋能级而产生的**吸收波谱**。

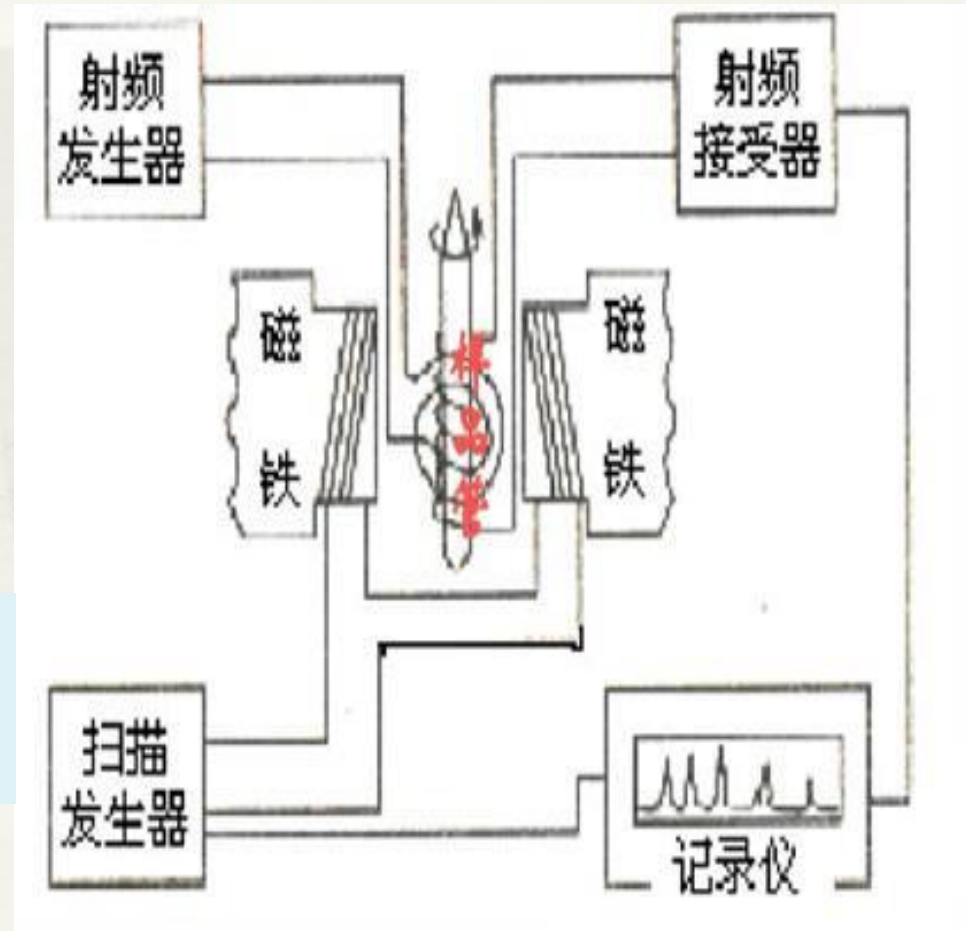
检测电磁波被吸收的情况就可以得到核磁共振波谱，根据波谱图上共振峰的位置，强度，精细结构可以研究分子结构。

核磁共振产生的条件

- 1) 核有自旋（磁性核）即：I不等于零
- 2) 外磁场 H_0
- 3) 照射频率与外磁场的关系满足：

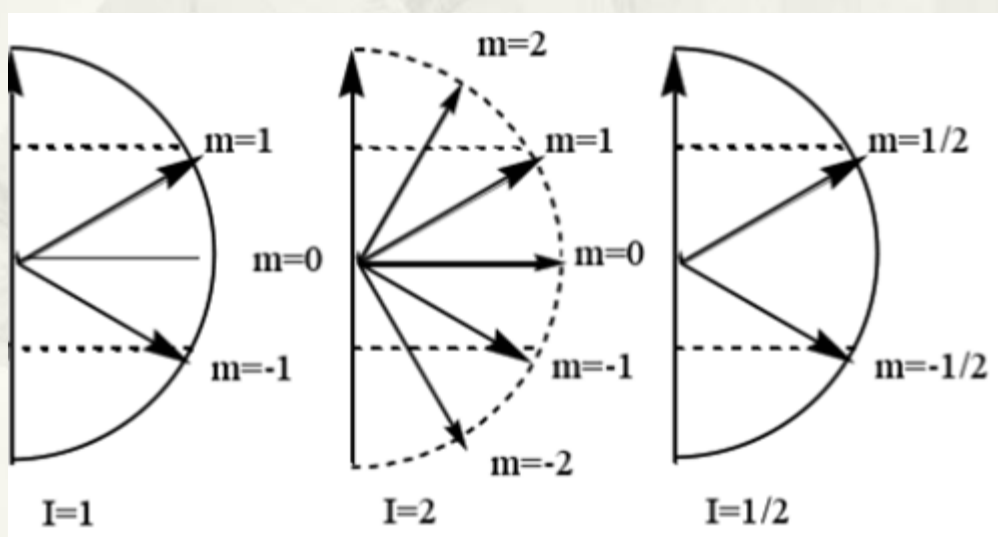
$$\vec{\mu} = \gamma \vec{p} \quad p = \frac{h}{2\pi} \sqrt{I(I+1)}$$

$$\nu_0 = \frac{\gamma}{2\pi} H_0$$



自旋核在磁场中的取向和能级

质子核磁矩在外加磁场中空间量子化，有 $2I+1$ 种可能的空间取向，取值范围为 $I, I-1, \dots, -I, -I+1$ 。核磁矩在外磁场空间的取向不是任意的，是量子化的。



$$E = -\mu H_0$$

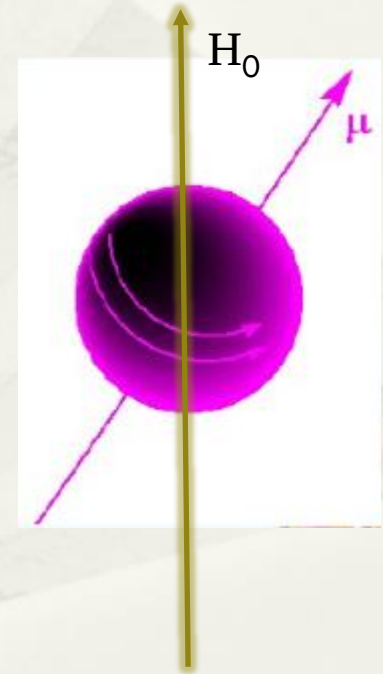
H_0 为磁场强度

原子核的进动

带正电荷的具有自旋量子数的核绕自旋轴旋转产生的磁场，
与外加磁场相互作用使得自旋磁场与外加磁场保持一夹角 Θ ，
这种回旋称为核的进动。

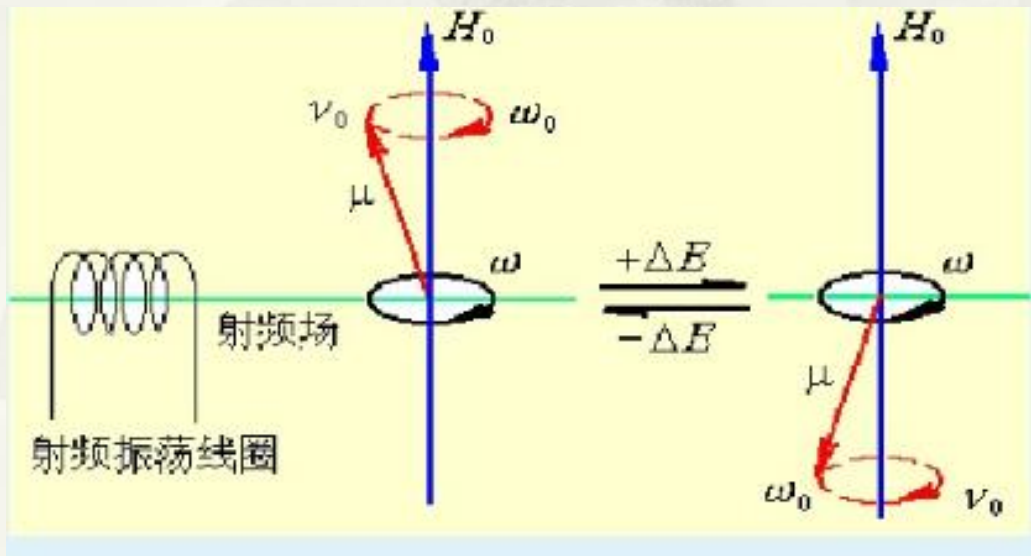
$$\nu_0 = \frac{\gamma}{2\pi} H_0$$

γ 称为磁旋比，每种核都有特定值，
单位为 $\text{T}^{-1}\text{S}^{-1}$ ；
 H_0 磁场强度；
 ν_0 为进动频率



核磁共振吸收条件

在外磁场中，原子核能级产生裂分，由低能级向高能级跃迁时，需吸收能量，当射频振荡线圈产生电磁波的能量 ($h\nu$) 等于核能级差 ΔE 就会有NMR（核自旋发生倒转）



$$\Delta E = \frac{\gamma \times h}{2\pi} H_0 = h\nu$$

（电磁波频率）



自旋量子数I与原子的质量数A及原子序数的关系

质量数 (A)	质子数	自旋量子数(I)	典型核
偶数	偶数	0	$^{12}\text{C}_6$, $^{16}\text{O}_8$, $^{32}\text{S}_{16}$
偶数	奇数	1, 2, 3...	$^2\text{H}_1$, $^{14}\text{N}_7$
奇数		$1/2$, $3/2$, $5/2$...	$^1\text{H}_1$, $^{13}\text{C}_6$, $^{17}\text{O}_8$, $^{33}\text{S}_{16}$



讨论共振条件

1. 对于同一种核， γ 为定值，共振频率 ν 随 H_0 发生变化。
2. 不同原子核， γ 不同，相同磁场强度 H_0 ，共振频率 ν 不同。
3. 实现NMR有两种方式
 - A. 固定 H_0 ，逐渐改变照射体系的频率——**扫频法**
 - B. 固定照射频率 ν ，逐渐改变磁场强度——**扫场法**



NMR的使用说明

1、样品前处理并装样

2、软件操作

氢谱一（除重水外，常规氘代试剂）

氢谱二（重水）

C谱

3、取出样品

4、数据拷贝

样品前处理并装样

擦拭核磁
管

装样

点击lift

数分钟后

再次点
击lift

软件操作（氢谱一）



软件操作（氢谱二）

在上述（4-5）步骤之间添加以下步骤，其他部分均相同



软件操作 (C谱)

前7步均相同

输入g,回车,
采样1024次



提前终止,
输入tr,回车



保存, 输入c
确认谱图



终止采样
stop

补充：其中确认谱图可重复操作，输入tr,再回车，输入c

操作结束及拷贝数据

点击lift,取
出样品



点击lift,关
闭气流



在D盘中用
光盘复制