

**ÓZBEKSTAN RESPUBLIKASÍ JOQARÍ HÁM ORTA ARNAWLÍ BILIM
MINISTRILIGI**

BERDAQ ATÍNDAĞÍ QARAQALPAQ MÁMLEKETLIK UNIVERSITETI

FIZIKA-MATEMATIKA FAKULTETI

FIZIKA KAFEDRASÍ

Fizika-matematika fakultetiniń 4-kurs studenti
Allambergenov Gúmisbektiń pitkeriw qánigelik jumısı

**AYÍRÍM MATERIALLARDAĞÍ
MAGNITLIK REZONANSTÍ OQÍW
LABORATORIYALARÍNDA ÚYRENIW**

Ilimiy basshısı hám
kafedra baslıǵı

professor B.Abdikamalov.

Nókis 2019

Mazmunı

Kirisiw.	3
I bap. Yadrolıq magnitlik rezonanstıń fizikalıq tiykarları.	5
1-Ş. Tiycarǵı fizikalıq principler jáne qatnaslar.	5
2-Ş. Yadrolardıń ximiyalıq polyarizaciyası.	8
3-Ş. Yadrolıq magnitlik rezonanstıń qollanıwı.	9
4-Ş. Blox teńlemeleri.	14
5-Ş. Juwmaqlar hám máseleń qoyılıwı.	17
II bap. Alınǵan sanlı hám eksperimentallıq nátiyjeler hám olardıń tallanıwı.	
.....	18
5-Ş. Sanlı modellestiriw máseleleri hám olardıń sheshimleri.	18
6-Ş. Yadrolıq magnitlik rezonanstı úyreniwge arnalǵan ekperimentallıq jumıstıń tiycarǵı principleri.	26
7-Ş. Eksperimentlerdi orınlaw ushın arnalǵan laboratoriyalıq dúzilis hám onıń bayanlaması.	28
8-Ş. Eksperimentallıq jumislardı orınlaw tártibi.	29
9-Ş. Eksperimentlerde alınǵan nátiyjeler hám olardı tallaw.	31
Pitkeriw qánigelik jumısı boyınsha ulıwmalıq juwmaqlar.	37
Paydalanılǵan ádebiyatlar dizimi.	38

Kirisiw

Yadroliq magnitlik rezonans (YMR) ilim menen texnikanıń hár qıylı oblastlarında júdá keń tarqaldı. Bul usıl atom yadrolarınıń magnit momentlerin ólshew boyınsha eń tiykarǵı hám eń dál usıl bolıp tabıladı. Yadroliq magnitlik rezonans usılınıń járdeminde organikalıq hám organikalıq emes molekulalardıń strukturası, qattı deneler menen suyıqlıqlardaǵı molekulalıq qozǵalıslar, fazalıq ótiwler, yadrolar arasındǵı jáne elektronlar menen yadrolar arasındǵı tásirlesiwler h.t.b. haqqında oǵada bay informaciyalar alınǵan. Onıń járdeminde kvantlıq elektronıkada paydalanılatuǵın energiya qáddileriniń inverslik toltırılıwları birinshi ret izertlendi.

Studentler yadroliq magnitlik rezonans boyınsha tájiriybelerdi orınlaw barısında elektromagnitlik maydannıń jutılıwı menen shıǵarılıwınıń kvantlıq xarakterde ekenligi menen tanısadı jáne eksperimentlerde spin menen magnit momentiniń bar ekenligin baqlaydı. Bunday tájiriybeler spinlik sistemalardıń ishindegi tásirlesiwlerdi, ferromagnetikler sıyaqlı ortalıqlardaǵı tásirlesiwlerdi úyreniwge múminshilik beredi.

Yadroliq magnitlik rezonans (YMR) dep sırtqı magnit maydanında jaylasqan spini nolge teń emes bolǵan yadrolarǵa iye zatlardıń yadrolardıń magnit momentleriniń baǵıtlarınıń ózgeriwiniń saldarınan júzege ketetuǵın jiyiligi v ge teń bolǵan elektromagnit tolqınıń rezonanslıq shıǵarıwı yamasa jutıwına aytadı. Usı v jiyiligi yadroliq magnitlik rezonans jiyiligi dep ataydı.

Yadroliq magnitlik rezonans qubılısı 1938-jılı Isidor Rabi tárepinen molekulalıq dástelerde ashıldı¹. 1946-jılı Stanford universitetinde islep atırǵan Feliks Blox hám Garvard universitetinde islep atırǵan Edvard Millz Parsell bir birinen gárezsiz suyıqlıqlarda hám qattı denelerde yadroliq magnitlik rezonanstı aldı hám usı ashılıw ushın olar 1952-jılı xalıq aralıq Nobel sıylıǵın alıwǵa miyasar boldı [1-3]².

Molekuladaǵı hár qıylı qorshawlarǵa iye birdey bolǵan yadrolar yadroliq magnitlik rezonanstıń hár qıylı signalların beredi. YMR dıń usınday signalınıń zat ushın standart signaldan ayırması úyrenilip atırǵan zattıń ximiyalıq qurılısına baylanıslı bolǵan ximiyalıq awısıw dep atalatuǵın awısıwdı anıqlawǵa múminshilik beredi³. Yadroliq magnitlik

¹ Isidor Ayzek Rabi (ingliz tilinde *Isidor Isaac Rabi*; 1898-jılı 29-iyul kúni Avstro-Vengriyadaǵı Rimunav qalasında tuwılǵan hám 1988-jılı 11-yanvar kúni AQSh ta Nyu-York qalasında qaytıw bolǵan) amerikalı fizik. "Atom yadrolarınıń magnitlik qásiyetlerin ólshewdiń rezonanslıq usılı ushın" 1944-jılı fizika boyınsha Nobel sıylıǵın alıwǵa miyasar bolǵan.

² Feliks Blox (nemis tilinde *Felix Bloch*; 1905-jılı 23-oktyabr kúni Cyurix qalasında tuwılǵan hám 1983-jılı 10-sentyabr kúni Cyurix qalasında qaytıw bolǵan) shweycariyalı fizik (milleti evrey). Tiykarınan Amerika Qurama Shtatlarında jumıs islegen.

Edvard Mills Parsell (sonıń menen birge Pyorsell, ingliz tilinde *Edward Mills Purcell*; 1912-jılı 30-avgust kúni AQSh taǵı Illinoys shtatındaǵı Teylorvill qalasında tuwılǵan hám 1997-jılı AQSh taǵı Massachusets shtatındaǵı Kembrij qalasında qaytıw bolǵan) amerikalı fizik. 1952-jılı Feliks Blox penen birlikte "dál yadroliq ólshewler ushın jańa usıllardı rawajlandırǵanı hám usıǵan baylanıslı ilimiy ashıwları" ushın xalıq aralıq Nobel sıylıǵın alıwǵa miyasar bolǵan.

³ Yadroliq magnitlik rezonanstǵı ximiyalıq awısıw zattıń ximiyalıq quramı menen baylanıslı bolǵan hám sırtqı magnit maydanın atomlardıń elektronları tárepinen ekranlawdıń saldarınan júzege keletuǵın awısıw bolıp tabıladı. Sırttan magnit maydanı túsirilgende elektronlardıń orbitalıq qozǵalıslarına baylanıslı atomlardıń diamagnitlik momenti payda boladı. Elektronlardıń usınday qozǵalısları effektivlik toqlardı payda etedi hám bul jaǵdayǵa sáykes Lorenc qaǵıydasına muwapıq ekinshi magnit maydanın payda etedi. Bul maydannıń shaması sırtqı magnit maydanına proporcional hám baǵıtı boyınsha qarama-qarsı. Bul ekinshi magnit maydanı yadronıń átirapında sırtqı magnit maydanına qosıladı hám nátiyjede atom yadrosı jaylasqan orındaǵı lokallıq magnit maydanı kishireyedi. Magnit maydanınıń salıstırmalı kishireyiwi protonda 10^{-5} ten awır yadrolardı 10^{-2} ge shekem jetedi. Nátiyjede yadroliq magnit energiyasınıń qáddileri arasındǵı qashıqlıq kishireyedi.

Ximiyalıq awısıw qubılısı 1951-jılı etil spirtinde ashıldı (formulası CH_3CH_2OH). Molekulaǵa kiretuǵın protonlardıń óz aldına rezonans qubılısı alındı.

rezonanstıń usıllarında zatlardıń ximiyalıq qurılısın, molekulalardıń konformaciyasın, bir birine tásir etiw effektleri, molekulalardıń ishindegi aylanıslardı anıqlaw ushın kóp múmkinshilikler bar.

Yadrolıq magnitlik rezonanstı (tómende qısqartılğan YMR ataması da keńnen qollanılğan) júdá ápiwayı tiller menen túsindiriw de múmkin. Onıń ushın magnit momenti μ ge hám qozǵalıǵ muǵdarınıń momenti $\hbar I$ ge teń yadronı qaraw kerek⁴. Eger momentler bir birine parallel jaylasqan bolsa, onda

$$\mu = \gamma \hbar I$$

teńligin jaza alamız. Bul ańlatpadaǵı kvantlıq-mexanikalıq qatnas γ turaqlı shama bolıp tabıladı. I arqalı $\hbar$ birliklerinde ańlatılğan yadrolıq qozǵalıǵ muǵdarınıń momentin belgilew qabıl etilgen. μ momenti menen sırtqı B_a magnit maydanı arasındaǵı óz-ara tásir etisiwge sáykes keletuǵın energiya

$$U = -\mu \cdot B_a$$

ańlatpasınıń járdeminde esaplanadı. Eger maydan z kósheriniń baǵıtında túsirilgen bolsa, yaǵnıy $B_a = B_0 \hat{z}$ teńligi orınlanatuǵın bolsa, onda

$$U = -\mu_z B_0 = -\gamma \hbar B_0 I_z$$

teńligi orınlı. I_z shamasınıń ruqsat etilgen mánisleri mınalar: $m_I = I, I - 1, \dots, -I$. Demek, energiyanıń ruqsat etilgen mánisleri ushın mınaday ańlatpaǵa iye bolamız:

$$U = m_I \gamma \hbar B_0.$$

$I = \frac{1}{2}$ bolǵan yadro magnit maydanında $m_I = \pm \frac{1}{2}$ ge teń mánisler ushın eki energiyalıq haldıń birewinde jaylasa aladı. Bul qatnas magnitlik rezonanslıq jutuwdıń tiykarǵı shárti bolıp tabıladı.

Bul pitkeriw qánigelik jumısında vodorodtıń (protonlar) hám ftordıń yadrolarınıń yadrolıq magnitlik rezonanslıq signalları izertleniledi. Eki yadronıń da spinleri $I = \frac{1}{2}$ ge teń hám sonlıqtan sırttan túsirilgen magnit maydanı B_0 baǵıtına salıstırǵanda tek eki baǵıtı ǵana bar. Usı eki energiya qáddileri arasındaǵı spinlerdiń ótiwin baqlaw ushın úlgi (polistirol, glicerin hám teflon) joqarı jiyilikli katushkaǵa ornalastırıladı. Al katushkanıń ózi bir tekli B_0 magnit maydanın payda etiwshi elektromagnittiń polyuslarınıń arasına jaylastırılǵan. Qosımsha B_0 statikalıq maydan eki modulyaciyalawshı katushkalardıń járdeminde turaqlı v jiyiliginde modulyaciyalanǵan. Usınday jollar menen paydalanılǵan dúziliste magnitlik maydanǵa baylanıslı rezonanslıq signal payda boladı. Eger rezonans shárti bolǵan

$$h\nu = \hbar\omega = E_{k+1} - E_k = -\gamma\mu_n B_0$$

shárti orınlanǵanda spinniń baǵıtın ózgertiwine baylanıslı bolǵan jutılıw energiyası joqarǵı jiyilikli katushka tárepinen registraciyalanadı. Yadrolıq magnitlik rezonanstıń signalı úlgiidegi spinlerdiń sanı N ge proporcional. Mısalı, magnit maydanındaǵı vodorodtıń yadrosınıń rezonanslıq jiyiligi shama menen 42,5 MHz qa teń. Usı shamanıń dál mánisi vodorod atomı jaylasqan ximiyalıq ortalıqtan ǵárezli. Bul ortalıqta sırtqı magnit maydanı B_0 ge qosımsha yadronı qorshap turǵan elektronlar payda etken lokallıq magnit maydanı da boladı. Nátiyjede rezonanslıq jiyiliktiń shaması bir tárepke qaray awısqan (jılısqan) boladı. Bunday awısıwdı (jılısıwdı) ximiyalıq awısıw (jılısıw) dep ataydı. Demek yadrolardı qorshap turǵan ortalıq payda etken magnit maydanlarınıń shamaların ólshewge múmkinshilik beretuǵın yadrolıq magnitlik rezonans usılı ximiya menen biologiyadaǵı áhmiyetli spektrallıq usıllardıń qatarına kiredi.

⁴ Biz "qozǵalıǵ muǵdarınıń momenti" hám "impuls momenti" atamaların birdey mániste paydalanamız.

I bap. Yadrolıq magnitlik rezonanstıń fizikalıq tiykarları

1-§. Tiycarǵı fizikalıq principler jáne qatnaslar

Yadrolıq magnitlik rezonanstıń tiycarında spini (menshikli magnit momenti) nolge teń bolmaǵan atom yadrolarınıń magnitlik qásiyetleri jatadı.

Barlıq yadrolar elektr zaryadına iye. Yadrolardıń kópshiliginde bul zaryad yadronıń kósheriniń dógereginde "aylanadı" hám yadrolıq zaryadtıń usınday aylanıwı magnitlik dipollik momentti júzege keltiredi. Júzege kelgen usınday moment sırtqı magnit maydanı menen tásirlese aladı. Jup protonlarǵa hám jup neytronlarǵa iye barlıq yadrolar (jup-jup yadrolardıń) tiycarǵı halda turǵanda aylanbalı momentke, usıǵan sáykes dipollik magnit momentine iye bolmaydı. Basqa yadrolar μ magnit momentine iye bolıp, tiycarǵı halda nollik emes $J = \hbar I$ aylanbalı momentke iye boladı. Magnit momenti μ menen aylanbalı moment J arasında mınaday qatnas bar [4-16, 27]

$$\mu = \gamma J.$$

Bul ańlatpalarda $\hbar$ arqalı Plank turaqlısı, I arqalı spin kvant sanı, γ arqalı giromagnitlik qatnas belgilengen.

Yadronıń múyeshlik momenti de, magnit momenti de kvantlangan hám usı múyeshlik hám magnit momentleriniń ıqtıyarlı túrde saylap alınǵan koordinatalar sistemasınıń z kósherine túsirilgen proekciyasınıń menshikli mánisleri

$$J_z = \hbar \mu_I \text{ hám } \mu_z = \gamma \hbar \mu_I$$

formulalarınń járdeminde anıqlanadı. Bul ańlatpada μ_I arqalı yadronıń menshikli halınıń magnit kvant sanı belgilengen. μ_I shamasınıń mánisleri yadronıń spin kvant sanınıń járdeminde anıqlanadı:

$$\mu_I = I, I - 1, I - 2, \dots, -I.$$

Demek yadro $2I + 1$ halda tura aladı eken.

Protonda (yamasa $I = 1/2$ bolǵan basqa da yadrolarda, mısalı, ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P h.t.b.) μ_z tek eki halda tura aladı:

$$\mu_z = \pm \gamma \hbar I = \pm \frac{\gamma \hbar}{2}.$$

Bunday yadronı ıqtıyarlı túrde alınǵan koordinatalar sistemasınıń z kósheriniń oń baǵıtına parallel yamasa antiparallel baǵıtlangán baǵıtlangán z qurawshısına iye magnit dipoli sıpatında qaraw múmkin.

^6Li yadrosında (yamasa $I = 1$ bolǵan basqa yadroda, ^{14}N , ^{32}P h.t.b.) μ_z tek úsh halda tura aladı

$$\mu_z = \gamma \hbar (-1; 0; +1).$$

Sırttan magnit maydanı túsirilmegen jaǵdayda hár qıylı μ_z lerge iye barlıq hallar birdey energiyaǵa iye boladı (yaǵnıy azǵınǵan boladı). Azǵınıw sırttan magnit maydanı túsirilgende joǵaladı. Bunday jaǵdayda azǵınǵan halǵa salıstırǵandaǵı energiya qáddileriniń ayrılıwınıń shaması sırtqı magnit maydanınıń shamasına proporcional hám sırtqı B_0 magnit maydanında turǵan I kvantlıq sanǵa iye yadro ushın $2I + 1$ dana $-\mu_z B_0, -\frac{I-1}{I} B_0, \dots, \frac{I-1}{I} B_0, \mu_z B_0$ energiya qáddileri payda boladı. Demek, yadrolıq magnitlik rezonans qubılısı Zeeman effektiniń tábiyatına iye boladı (Zeeman effektinde elektronlıq qáddiler magnit maydanında bir neshe qáddilerge bólinedi).

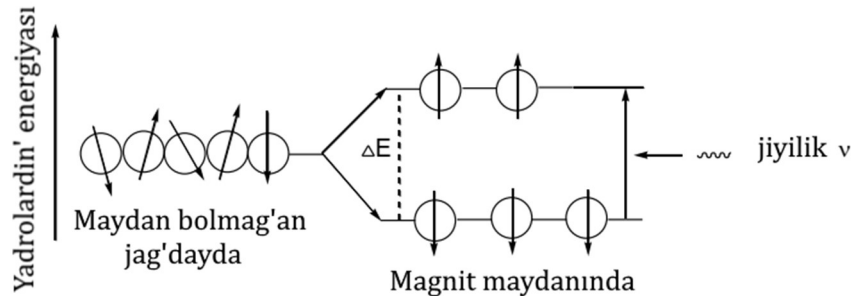
Spini $I = 1/2$ shamasına teń yadro ushın ápiwayı jaǵdayda, mısalı proton ushın bóliniw

$$\delta E = \pm \mu_z B_0$$

hám spinlik hallardıń energiyalarınıń ayırması

$$\Delta E = 2\mu_z B_0$$

shamasına teń boladı. Bul ańlatpa tek ΔE energiyasınıń shaması B_0 ge proporcional dep tastıyıqlaydı (sebebi basqa shamalar konstantalar bolıp tabıladı). Yadrolıq magnit momenti ushın tán shaması 1 T bolǵan magnit maydanı ushın qáddilerdiń bóliniwi radiodiapazonda jaylasqan elektromagnit maydanınıń jiyiliginе sáykes keletuǵın energiyalardıń diapazonında jatadı.



1-súwret. Sırtqı magnit maydanınıń tásirinde protonlardıń orientaciýalarınń ózgerisi.

Eki qáddiden turatuǵın sistema payda bolsa, onda turaqlı B_0 magnit maydanında usı qáddiler arasındaqı ótiwlerdi qozdırıw ushın energiyanı jiyiligi radio tolqınlarınń ν jiyiligindegi energiyanı beriwimiz kerek. Yadrolıq magnitlik rezonanstıń ν jiyiligin magnit maydanınıń kernewligi menen baylanıstıratuǵın fundamentallıq teńlemesi

$$\nu = \frac{2\pi\mu}{\hbar I}$$

túrinde jazıladı. Sebebi $\Delta E = \hbar\nu$.

Nurlanıwdıń jiyiligi megagerclik (MHz) diapazonda jatadı. B_0 maydannıń shaması 2,35 T bolǵan jag'dayda protonlar ushın nurlanıw jiyiligi 100 MHz shamasında boladı. Eger maydannıń shaması n ese úlkeyetuǵın bolsa, rezonanstıń jiyiligi de sonshama úlkeyedi. Jiyilik penen maydannıń qatnası $\gamma/2\pi$ shamasına teń bolǵanda sistema rezonans halında turadı; proton energiyanı jutadı hám joqarıraq energiya qáddine ótedi. Bunday spektrdi jazıp alıw múmkinshiligi tuwıladı hám usı múmkinshilik tiykarında yadrolıq magnit rezonansınıń spektroskopiyası ataması payda bolǵan. γ turaqlısın giromagnitlik qatnas dep ataydı hám ol fundamentallıq yadrolıq turaqlı shama bolıp tabıladı. Giromagnitlik qatnas dep μ magnit momenti menen yadronıń spini I arasındaqı proporcionallıq koefficientke aytadı:

$$\gamma = \frac{2\pi\mu}{\hbar I}.$$

Biz proton ushın $\gamma = 2,675 \cdot 10^4 \text{ rad}/(\text{sek} \cdot \text{Gs}) = 2,675 \cdot 10^8 \text{ rad}/(\text{sek} \cdot \text{tesla})$ ekenligin atap ótemiz. Eger magnitlik rezonanslıq jutılıwdıń tiykarǵı formulasın

$$\omega_0 = \gamma B_0$$

túrinde jazatuǵın bolsaq [Kittel], onda jiyilik ushın

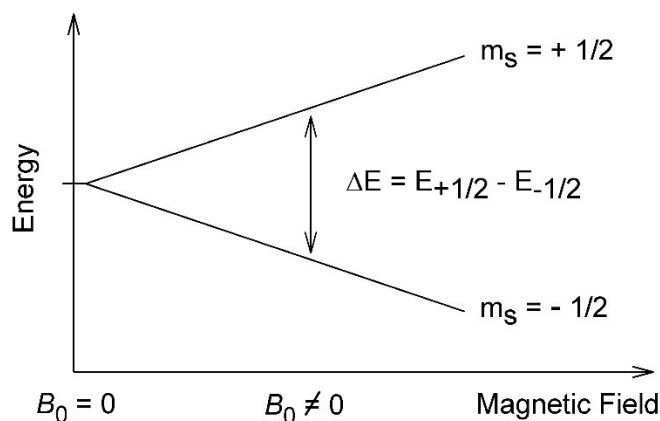
$$\nu \text{ (MHz)} = 4,258 B_0 \text{ (kGs)} = 42,58 B_0 \text{ (tesla)},$$

al elektron ushın

$$\nu \text{ (GHz)} = 2,80 B_0 \text{ (kGs)} = 28,0 B_0 \text{ (tesla)}$$

ekenligin atap ótemiz.

Radio jiyiligindegi energiya jiyiliklerdiń bazı bir diapazonında [continuous-wave (CW) yamasa úzliksiz rejim] úzliksiz skanerlew rejiminde yamasa óz ishine jiyiliklerdiń barlıq jıynaǵın alatuǵın qısqa radio jiyilikli rejimde (impulsli rejim) ámelge asırılıwı múmkin. Bul eki usıl yadrolıq magnitlik rezonans spektrometrleriniń hár qıylı bolǵan eki tipine sáykes keledi.



2-súwret.
Magnit maydanında spin kvant sanı
 $I = \frac{1}{2}$ bolğan yadronıń energiya
qáddileriniń bóliniwi.

z kósheriniń dógerinde tosınnan alınatuǵın faza menen precessiyalanatuǵın protonlar (yaǵnıy turaqlı B_0 magnit maydanınıń dógerinde) z kósheriniń baǵıtındaǵı qosındı makroskopıyalıq magnitleniwdi payda etedi (biraq xy tegisliginde emes).

Másele mınadan ibarat: turaqlı magnit maydanında baǵıtlangan protonlarǵa radio jiyiligindegi elektromagnitlik energiyalı qalay beriw kerek hám bunnan keyin joqarı spinlik halǵa ótken proton tárepinen jutılǵan energiyalı qalayınsha ólshew kerek? Bul másele klassikalıq mexanikanıń terminlerinde anıqlaw múmkin. Bunday jaǵdayda protondı sırtqı magnit maydanında aylanatuǵın bólekshe dep qaraw kerek. Gravitaciya maydanınıń tásirinde kósheri qıyalanǵan zırıldawıq qanday bolıp precessiyaǵa ushıraytuǵın bolsa, proton da z kósheriniń baǵıtındaǵı B_0 turaqlı magnit maydanında tap sonday bolıp precessiyalanadı.

Sırttan túsiriletuǵın joqarı jiyilikli maydanniń jiyiligi (ν_1) ekvivalent protonlardıń precessiyasınıń jiyiligine teń bolsa (klassikalıq fizikada bunday jiyilikti Larmor jiyiligi dep ataydı hám onı ν_L arqalı belgileydi jáne MHz lerde ólshenedi) yadrolıq magnitlik rezonans halı júzege keledi hám yadrolıq magnitlik rezonanstıń tiykarǵı teńlemesi bilayınsha jazıladı

$$\nu_L = \nu_1 = \frac{\gamma}{2\pi} B_0.$$

Bul teńlemenı izolyaciyalanǵan protonlardıń ansambli ushın qollanıwǵa boladı.

Zatlardıń kópshiliginde atomlar elektronlıq qabıqlardaǵı elektronlardıń turaqlı magnit momentlerine iye bolmaydı. Bul qubılıs orbitalıq momenttiń qatırılıwı (muzlanıwı - замораживание) menen baylanıslı⁵.

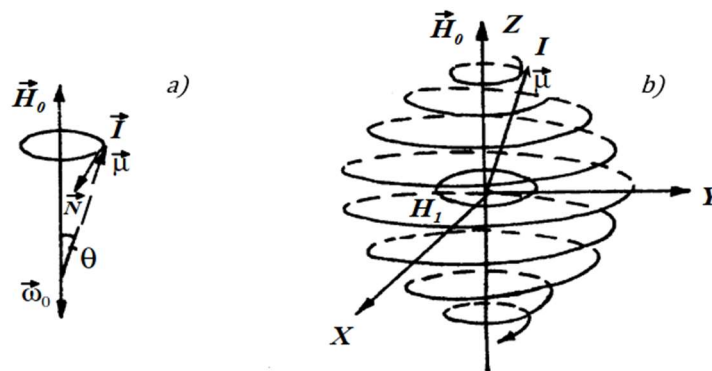
Metallardaǵı yadrolıq magnit rezonansınıń rezonanslıq jiyilikleri diamagnetiklerdegi rezonanslıq jiyiliklerden úlken. Bunday jaǵdaydı Nayt awısıwı dep ataydı⁶.

Eger Z kósheriniń baǵıtındaǵı turaqlı magnit maydanı ($H_0 \uparrow Z$) menen bir qatarda XY tegisligine ω_0 jiyiligi menen spinniń precessiyasınıń baǵıtında aylanatuǵın maydan túsirilse, onda $\omega = \omega_0$ shárti orınlangan jaǵdayda $N_1 = [\mu_1 H]$ kúsh momentiniń tásirinde θ múyeshiniń úzliksiz ózgerisi orın aladı (θ múyeshi haqqında mınalardı aytıw múmkin: precessiyada θ múyeshi turaqlı bolıp qaladı hám onıń mánisi bóleksheniń magnit maydanı

⁵ Orbitalıq momenttiń qatırılıwı (ingliz tilinde *Orbital-Moment Quenching*) — kvantlıq mexanikanıń paradoksı bolıp tabıladı. Klassikalıq mexanikanıń nızamlarına sáykes atomlardaǵı p, d, ... hallarda turǵan elektronlar yadrolardıń átiraplarında $H = \frac{e}{mc} L/r^3$ (bul ánlapada L arqalı qozǵalısh muǵdarınıń orbitalıq momentini belgilengen) shamasındaǵı magnit maydanın payda etiwı, usınıń saldarında ftor atomınıń yadrosınıń átirapında 600000 Gs shamasındaǵı magnit maydanınıń bolıwı kerek. Al haqıyqatında atomlar menen molekulalarda bunday magnit maydanları baqlanbaydı.

⁶ Nayt awısıwı (Nayt jılıwı) (ingliz tilinde *Knight Shift*) — metallardaǵı ótkizgishlik elektronların yadrolar menen júdá ázzi tásirlesiwleriniń saldarınan metallardaǵı yadrolıq magnitlik rezonans jiyiligi ω_m niń diamagnetiklerdegi ω_d yadrolıq magnitlik rezonanstıń jiyiligine salıstırǵanda $\omega_m = \omega_d + \Delta\omega$ shamasında úlken bolıwı.

menen tásir etisiw energiyası $W = -(\boldsymbol{\mu}_I \mathbf{H}_0) = \mu_I H_0 \cos \theta$ formulasınıń járdeminde anıqlanadı). Bunday jaǵdayda tásirlesiw energiyası W ózgeredi hám energiyanıń nurlandırılıwı yamasa jutılıwı orın aladı. Eger $\mathbf{H}_1$ maydanı larmor jiyiliginen basqa jiyilik penen aylanatuǵın bolsa (usınday jaǵdayǵa aylanıwshı koordinatalar sistemasındaǵı Blox teńlemeleri sáykes keledi), onda $\mathbf{N}_1$ momenti shaması boyınsha da, baǵıtı boyınsha da ózgeriske ushıraydı. Nátiyjede precessiyalıq qozǵalıw ózgeriske ushıraydı. Sonlıqtan, $\mathbf{H}_1$ maydanniń múyeshlik jiyiligi precessiyanıń larmor jiyiligi menen teń bolǵan jaǵdaylarda rezonans júzege keledi (3-súwret).



3-súwret. $\boldsymbol{\mu}_I$ magnit momentiniń magnit maydanındaǵı qozǵalıwı.

a) turaqlı $\mathbf{H}_0$ magnit maydanındaǵı.

b) turaqlı $\mathbf{H}_0$ hám aylanıwshı $\mathbf{H}_1$ magnit maydanınıń tásirindegi [17].

2-§. Yadrolardıń ximiyalıq polyarizaciyası

Magnit maydanında ótetuǵın bazı bir ximiyalıq reaksiyalarda reaksiyalardıń ónimleriniń yadrolıq magnitlik rezonansınıń spektrlerinde anomal úlken jutılıw yamasa radio nurlanıw baqlanadı. Bul fakt reaksiyanıń ónimleriniń molekulalarındaǵı yadrolıq Zeeman qáddileriniń teń salmaqlı emes toltırılıwı menen túsindiriledi. Tómeni qáddiniń artıqmash toltırılıwı anomal jutılıw menen júredi. Inversiyalıq toltırılıw (joqarǵı qáddi tómeni qáddige salıstırǵanda kóbirek toltırılǵan) radionurlanıwǵa alıp keledi. Usı qubılıstı yadrolardıń ximiyalıq polyarizaciyası dep ataydı.

Ximiyalıq jaqtan indukciyalanǵan yadrolardıń dinamikalıq polyarizaciyası – jıllılıqtıń tásirinde yamasa fotoximiyalıq radikallıq reaksiyalarda hám yadrolıq magnitlik rezonans spektroskopiyası járdeminde kúsheytilgen jutıw yamasa shıǵarıw signalları túrinde registraciyanatuǵın yadrolıq magnitlik qáddilerdiń teń salmaqlı emes toltırılıwı. Reaksiyalardıń ónimlerinde detektorlanatuǵın yadrolıq magnitleniw teń salmaqlıqtaǵı jaǵdaydan júzlegen ese úlken boladı. Usınday qubılıslar elektronlıq paramagnitlik rezonanstıń spektrlerinde de tabılǵan. Bul qubılıslardıń barlıǵı da ximiyalıq reaksiyalardıń tásirindegi elektronlardıń teń salmaqlı emes polyarizaciyasınıń belgisi bolıp tabıladı (elektronlardıń ximiyalıq polyarizaciyası).

1-keste.

Ayırım atom yadrolarınıń larmor jiyilikleri

Yadro	0,5 Tesla bolǵandaǵı larmor jiyiligi, MHz	1 Tesla bolǵandaǵı larmor jiyiligi, MHz	7,05 Tesla bolǵandaǵı larmor jiyiligi, MHz
^1H (Vodorod)	21,29	42,58	300,18
^2D	3,27	6,53	46,08

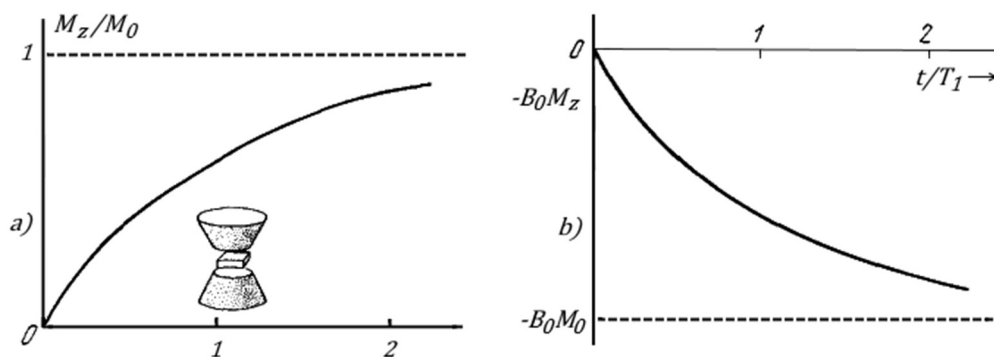
^{13}C (Uglerod)	5,36	10,71	75,51
^{23}Na (Natriy)	5,63	11,26	79,40
^{39}K (Kaliy)	1,00	1,99	

Protonlar ushın rezonans jiyiligi qısqa tolqınlar diapazonında jaylasqan (tolqın uzınlığı shama menen 7 m).

3-§. Yadrolıq magnitlik rezonanstıń qollanılwı

YMR-Spektroskopiya

Yadrolıq magnitlik rezonanstıń spektroskopiya, YMR-spektroskopiya yadrolıq magnit rezonansı qubılısın paydalanatúǵın ximiyalıq obyektlerdi izertlewdiń spektroskopiyalıq usılı bolıp tabıladı. Ximiya hám ámeliy jaqtan paydalanıw ushın protonlıq magnitlik rezonans spektroskopiya (PMR-spektroskopiya) hám uglerod-13 yadrosındaǵı (bunday spektroskopiyanı kóbinеше ^{13}C YMR-spektroskopiya dep ataydı), ftor-19 daǵı (^{19}F YMR-spektroskopiya), fosfor-31 (^{31}P YMR-spektroskopiya) YMR spektroskopiya bolıp tabıladı. Eger elementtiń qatar sanı taq yamasa qanday da bir elementtiń (qatar sanı jup bolsa da) izotopı taq massalıq sanǵa iye bolsa, onda bunday elemnettiń yadrosı nolge teń emes spinge iye boladı. Qozǵan haldan normal halǵa ótkende yadrolar qozıw energiyasın qorshaǵan ortalıqqa – "pánjerege" beredi. Bunday jaǵdayda "pánjere" degende izertlenip atırǵan emes, al basqa sorttaǵı elektronlardı yamasa atomlardı túsinedi. Energiyanı beriwdiń usınday mexanizmin spin-reshetkalıq relaksaciya dep ataydı. Onıń effektivligi spin-reshetkalıq relaksaciya waqıtı dep atalatúǵın T_1 waqıtı menen xarakterleniwı múmkin.



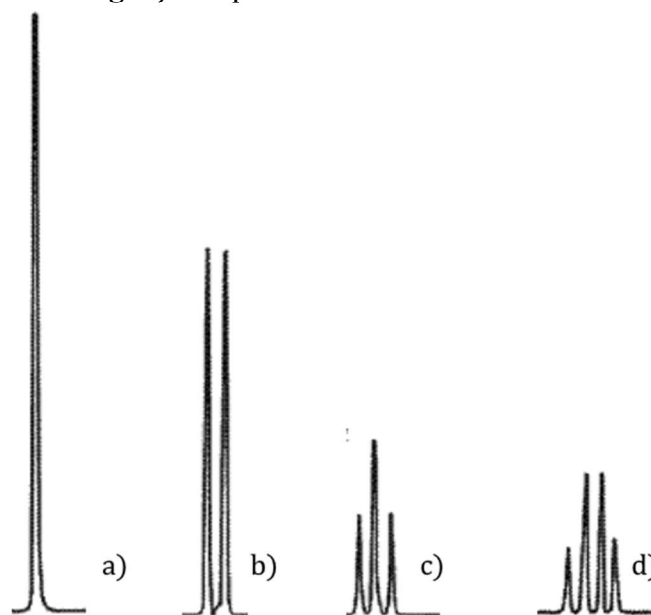
4-súwret.

- Maydandı qosqanda magnitlengenliktiń waqıttıń ótii menen ózgerisi. $t = 0$ waqıt momentinde $M_z(0) = 0$ bolǵan magnitlenbegen úlginı turaqlı B_0 magnit maydanına jaylastıradı. Magnitleniw waqıtıń ótiwi menen ósedi hám eń aqırında jańa teń salmaqlıq $M_0 = \chi_0 B_0$ mánisine jetedi. Bul eksperiment boylıq relaksaciya waqıtı T_1 di anıqlaydı.
- Sistemanıń magnitlik energiyasınıń waqıtıń ótiwi menen ózgeriwi. a) eksperimentte tómengi qáddidegi spinlik toltırılıwdıń úlkeyiwi menen magnit energiyasınıń tıǵızlıǵı $-MB$ kishireyedi. $t \gg T_1$ bolǵan waqıtta jetetuǵın asimptotalıq mánisi $-M_0 B_0$. Energiya spinler sistemasınan reshetkanıń terbelisleriniń sistemasına ótedi. Sonlıqtan T_1 waqıtın spin-reshetkalıq relaksaciya waqıtı dep ataydı.

Infraqızıl spektroskopiya sıyaqlı yadrolıq magnitlik rezonans ximiyalıq zatlardıń molekullıq strukturası haqqındaǵı informacijalardı ayqınlastıradı. Biraq ol infrakızıl spektroskopiyaǵa salıstırǵanda tolıǵıraq informaciya menen támiyinley aladı hám úlgilerdegi dinamikalıq processlerdi (ximiyalıq reakcijalardıń tezlikleriniń konstantaları, molekullar ishindegi aylanıwdıń energiyalıq bareriniń shamasın anıqlaw) úyreniwge

múmkínshilik beredi. Sonıń menen birge YMR ximiyalıq reaksiyalardaǵı aralıqlıq bólekshelerdiń spektrlerin jazıp alıw múmkínshiligini jaratıp beredi.

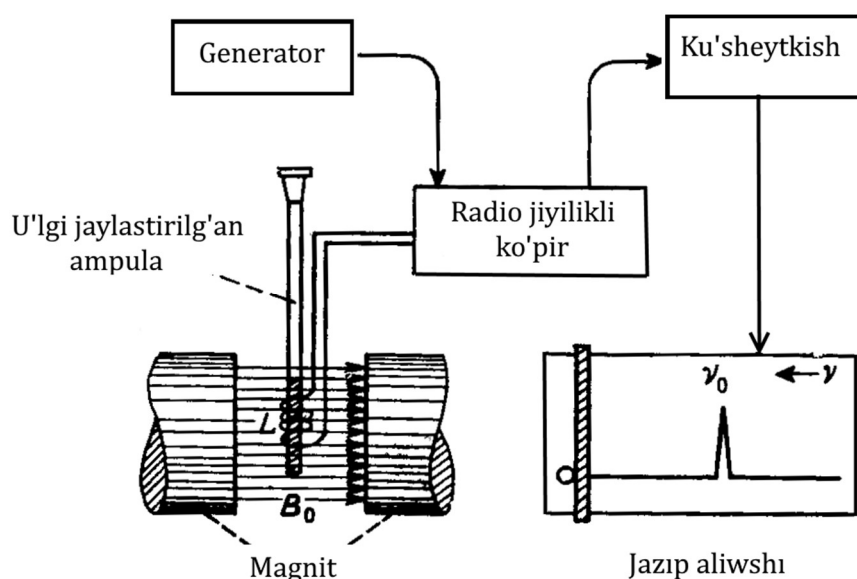
5-súwret.
 ^1H tıń (protonnıń) YMR
 signalları.
 a) singlet,
 b) dublet,
 c) triplet,
 d) kvadruplet.



Bunday ózgeshelikler YMR-spektroskopıyanı teoriyalıq organikalıq ximiyada da, biologiyalıq objektlerdi tallaǵanda da eń qolaylı qurallardıń birine aylandıradı.

Ásbap-úskeneler

Yadrolıq magnitlik rezonans spektrometrindegi tiykargı bólim kúshli magnit bolıp tabıladı. Birinshi ret Parsell tárepinen ámelge asırılǵan eksperimentte diametri shama menen 5 mm ge teń ampulaǵa jaylastırılǵan úlgi kúshli elektromagnittiń polyuslarınıń arasına jaylastırılǵan. Bunnan keyin magnit maydanınıń bir tekli bolıwın jaqsılaw ushın ampulanı aylandıra baslaydı, al oǵan tásir etetuǵın magnit maydanın turaqlı túrde kúsheytip baradı. Nurlanıw deregi sıpatında joqarı sapaǵa (добротность) iye radio jiyilikli generator paydalanıladı. Kúsheyiwshi magnit maydanınıń tásirinde yadrolardı rezonansqa ushıratadı, al spektrometr tap usınday rezonans jiyiligine tuwrılǵan bolıwı kerek. Bunday jaǵdayda ekranlasqan yadrolar elektronlıq qabıqlardan ayrılǵan yadrolarǵa salıstırǵanda sál kishilew jiyilikte rezonansqa ushıraydı. Energiyanıń jutılıwı radio jiyilikli zondtıń járdeminde baqlanadı hám arnawlı dúzilistiń járdeminde (samopisectiń járdeminde) jazıp alınadı. Jiyilikti rezonanstıń júzege keliwi múmkín emes bolǵan qanday da bir shekke shekem kóteredi.



6-súwret. Yadrolıq magnitlik rezonansnıń spektrometriniń blok-sxeması.

7-súwret.

Bruker 700 MHz yadrolıq magnitlik rezonanslıq (NMR) spektrometr.
(Kanada) [18].



Mosttan kelip túsetuǵın toqlardıń shaması júdá kishi bolǵanlıqtan tek bir spektrdi túsiw menen sheklenbeydi. Ádette bir neshe onlaǵan ótiwlerdi (skannerlewlerdi) ámelge asıradı. Alınǵan signallardıń barlıǵı qosıladı hám eń aqırǵı grafik túrinde súwretlenedi. Alınǵan grafiktiń sapası signal/(ásbaptaǵı shawqım) qatnasınan ǵárezli boladı.

Bul usılda (metodta) úlgi jıylıǵı ózgermeytuǵın radio jiylikli toqlar menen nurlandırıladı hám magnit maydanınıń kúshi ózǵertiledi. Sonlıqtan usınday metodtı úzliksiz nurlandırw usılı dep te ataydı (CW, continous wave).

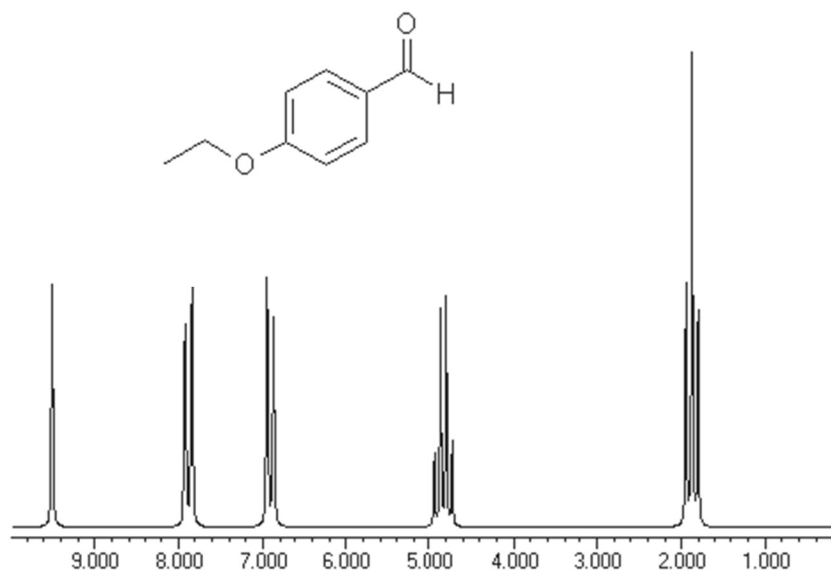
YMR-spektroskopiyanıń dástúrge aylanǵan usılı kóp sanlı kemshiliklerge iye. Birinshiden, usıl hár bir spektrdi qurıw ushın kóp waqıttı talap etedi. Ekinshiden, usıl sırttan kesent beretuǵın basqa da signallarǵa úlken talaplar qoyıwǵa tuwrı keledi, alınatuǵın spektrler kúshli shawqımlarǵa iye boladı. Úshinshiden, usıl joqarı jiylikli spektrometrlerdi dóreiw ushın jaramlı (300, 400, 500 hám onnan da joqarı MHz). Sonlıqtan házirgi zaman YMR ásbap-úskenelerinde alınǵan signallardıń fure-túrlendiriwlerine tiykarlanǵan

impulslik spektroskopiya usılı qollanıladi (PW). Búgingi kúnleri barlıq YMR-spektrometrleri magnit maydanınıń shaması turaqlı bolǵan quwatlı asa ótkizgish magnitlerde qurıladi.

Impulslik variantta (CW-usıldan ózgesheligi) yadrolardıń qozdırılıwı "turaqlı tolqın" menen emes, al bir neshe mikrosekund dawam etetuǵın qısqa impulstıń járdeminde ámelge asırıladi. Impulstıń jıyılık qurawshılarınıń amplitudaları ν_0 den qashıqlıqtıń úlkeyiwine baylanıslı kishireyedi. Biraq barlıq yadrolardıń birdey bolıp nurlandırılıwı ushın "qattı impulsler", yaǵnıy úlken quwatlıqqa iye impulsar paydalanıladi. Impulstıń qansha waqt dawam etetuǵınlıǵı mınaǵan baylanıslı: jıyılık jolaqtıń keńligi spektrdiń keńliginen on-júz ese úlken bolıwı kerek. Quwatlıqtıń shaması bir neshe mın wattqa jetedi.

Impulslik spektroskopiyanıń nátiyjesinde rezonanstıń pikleri kórinip turatuǵın ádettegidey spektr emes, al sóniwshi rezonanslıq terbelistiń súwreti alınadi. Bul súwrette rezonansqa ushıraytuǵın barlıq yadrolardıń barlıq signalları aralasıp ketken [bunday súwrette "erkin indukciyanıń kemeyiwı" (FID, *free induction decay*) dep te ataydı]. Alınǵan spektrdi túrlendiriw ushın matematika iliminde keńnen belgili bolǵan fure-túrlendiriwi dep atalatuǵın túrlendiriwden paydalanadi. Biz qálegen funkciyanı kóp sanlı garmonikalıq terbelislerdiń summası dep qarawdıń múmkin ekenligin bilemiz.

Yadrolıq magnitlik rezonanstıń spektrleri



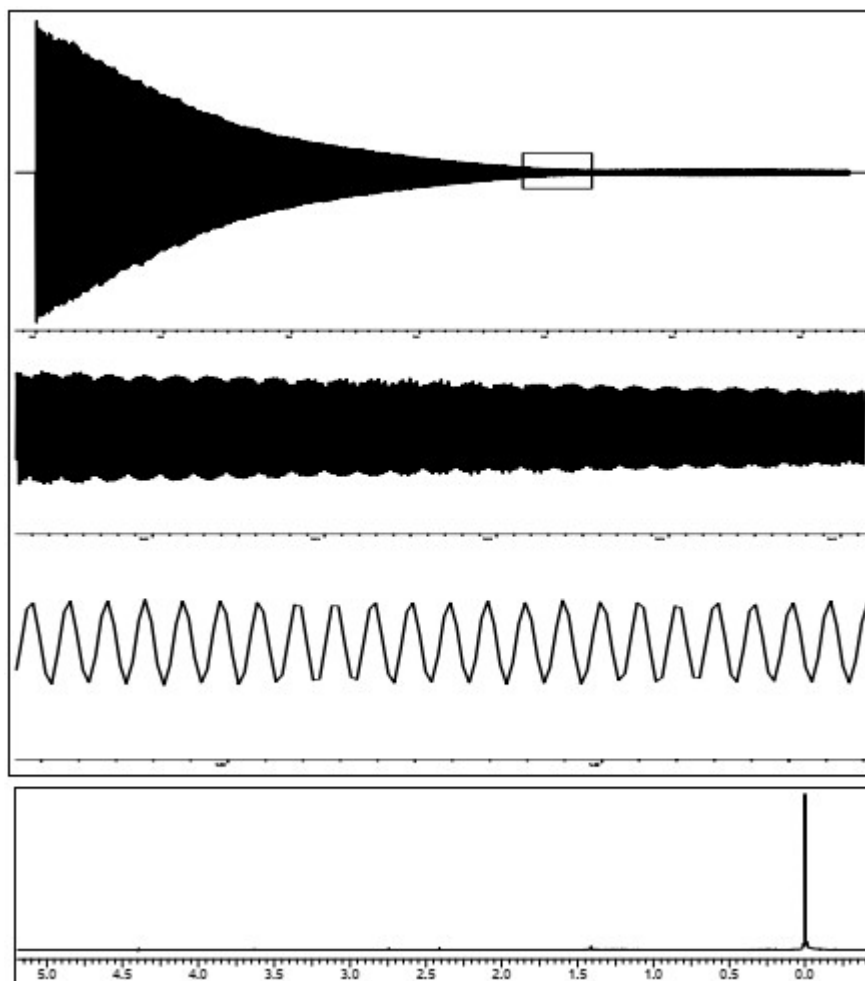
8-suwret.

^1H 4-etoksibenzaldegidtiń spektri. Ázzi maydanda (singlet $\sim 9,25$ м.д.)⁷ aldegidlik gruppanıń signalı, kúshli maydanda (triplet $\sim 1,85\text{-}2$ м.д.) etoksillik gruppanıń metiliniń protonlarınıń signalları.

Yadrolıq magnitlik rezonanstıń járdeminde sapalıq tallaw júrgiziw ushın usı usıldıń oǵada zor qásiyetlerine tiykarlanǵan tómendegidey spektrlerdi tallawlar paydalanıladi:

- belgili bolǵan funkcionallıq gruppalarǵa kiretuǵın atom yadrolarınıń signalları spektrdiń belgili bir uchastkalarında jaylasadı;
- pik tárepinen sheklengen integrallıq maydannıń shaması rezonanslanatuǵın atomlardıń sanına tuwrı proporcional;
- 1-4 baylanıs arqalı baylanısatuǵın yadrolar multipletlik signallardı beriw qábiletligine iye (bir birinde toyınıw dep atalatuǵın qubılıstıń nátiyjesinde).

⁷ YMR-tallaw praktikasında ximiyalıq jıljıwdıń shaması millionnan bir úleste beredi (rus tilinde м.д.) hám "δ" arqalı belgileydi. Ximiyalıq jıljıwlar spektrometrdiń jumıs isleytuǵın jıyılıǵınen gárezli emes: $\delta = \Delta\nu \cdot 10^6 / (\text{ásbaptıń jumıs islew jıyılıǵı, Hz te})$. Ximiyalıq jıljıwdıń shamasın biz de "м.д." arqalı belgileyemiz.



9-сұwрет. Импульслиқ YMR-спектрoметрдің "шығıwında" алынатуғын сұwрет (еркін индукциyanың 3,2 c waқыт ішіндегі кемeyіwі, $\sim 1/10$ hám ~ 1.100 бóлекке "kesip алынған") hám fure-тúрлендириwдің нáтиyjesi (^1H тiң YMR спек три). Obyekt tetrametilsilan $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$.

YMR spektrлеріндегі signalдың орны олардың эталонлық signalға салыстырғандағы xимиялық jілjıwın (awısıwın) xarakterleydi. ^1N hám ^{13}S yadroлық magnitlik rezonansında usınday etalon sıpatında tetrametilsilan $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$ (TMS) qollanıladı. Xимиялық jілjıwдың бирлигі sıpatında ásbaptıń jiyiliginiń millionnan бир úlesi алынған (м.д.). Eгер TMS тiң signalın 0 sıpatında qabil etsek hám ázzi maydandaғы signalдың awısıwın оń dep esapласаq, onda δ shkala dep atalatuғын shkalaға iye bolamız. Eгер tetrametilsilannıń rezonansın 10 м.д. ға теń dep alsaq hám belgilerdi qarama-karsı belgilerge ózгertsek, onda алынған shkala τ shkalası bolıp tabıladı (házirgi waqıtları paydalanılmaydı). Eгер zattıń спектри interpretaciya qılıw ushın dım quramalı bolsa, onda ekranlaw konstantası ushın esaplawdıń kvantlıq-mexanikalıq usılınan paydalanıwға tuwrı keledi.

Nobel sıylıqları

1952-jıl ushın fizika boyınsha Nobel sıylıғы Feliks Blox penen Edvard Mills Parsellge "Dál yadroлық magnitlik ólshewler ushın jańa usıllardı rawajlandırғанлығы hám onıń menen baylanıslı bolған ilimiy ashıwları ushın" berildi.

1991-jıl ushın ximiya boyınsha Nobel sıylıғы Rixard Ernstke "Joqarı ajırata alıwshılıqqa iye yadroлық magnitlik rezonanslıq spektroskopiyannıń metodologiyasın rawajlandırıwға qosқан úlesi ushın" berildi.

2002-jıl ushın ximiya boyınsha Nobel sıylığı (1/2 bólimi) Kurt Vyutrixke "Eritpedegi biologiyalıq makromolekulalardıń úsh ólshemli strukturasını anıqlaw ushın YMR-spektroskopiyasını paydalanıwdı islep shıqqanlığı ushın" berildi.

2003-jıl ushın fiziologiya hám medicina boyınsha Nobel sıylığı Pol Loterburğa hám Piter Mensfildke "Magnitlik-rezonanslıq tomografiya ushın islep shıqqanlığı ushın" berildi.

Joqarıda keltirilgen maǵlıwmatlar yadrolıq magnitlik rezonans penen tikkeley baylanıslı bolǵan ilimiy jumıslardıń tórtewiniń Nobel sıylığın alıwǵa miyasar bolǵanlığın kórsetedi [19].

4-§. Blox teńlemeleri

Blox teńlemeleri makroskopiyalıq fenomenologiyalıq teńlemeler bolıp tabıladı hám olardıń járdeminde yadrolıq magnitlengenlik $\mathbf{M} = (M_x, M_y, M_z)$ relaksaciya waqıtları T_1 hám T_2 waqıtları menen waqıttıń funkciyası túrinde esaplanadı. Fizikanıń yadrolıq magnitlik rezonans, magnitlik-rezonanslıq tomografiya, hám elektronlıq paramagnitlik rezonans sıyaqlı oblastlarında keńnen qollanıladı. Nobel sıylığınıń laureatı Feliks Bloxtıń húrmetine "Blox teńlemeleri" degen atamanı alǵan (teńlemeler birinshi ret 1946-jılı alındı). Ilimiy ádebiyatta geypara waqıtları yadrolıq magnitlengenliktiń qozǵalıstı teńlemesi dep te ataladı [20-22].

Blox teńlemeleri makroskopiyalıq teńlemeler bolıp tabıladı: olar makroskopiyalıq yadrolıq magnitlengenlik ushın qozǵalıstı teńlemesi bolıp tabıladı. Al makroskopiyalıq yadrolıq magnitlengenlik úlginıń ayırım yadrolıq magnit momentlerin bir biri menen qosıp shıǵıw jolı menen alınadı. Hár bir magnit momentiniń qásiyetlerin táriyiplew ushın Blox teńlemeleri jaramaydı.

Blox teńlemelerin laboratoriyalıq (stacionar) koordinatalar sistemasında bılayınsha jazadı:

$$\begin{aligned}\frac{dM_x(t)}{dt} &= \gamma(M(t) \times B(t))_x - \frac{M_x(t)}{T_2}, \\ \frac{dM_y(t)}{dt} &= \gamma(M(t) \times B(t))_y - \frac{M_y(t)}{T_2}, \\ \frac{dM_z(t)}{dt} &= \gamma(M(t) \times B(t))_z - \frac{M_z(t) - M_0}{T_1}.\end{aligned}\tag{1}$$

Bul ańlatpalarda $\mathbf{M}(t) = (M_x(t), M_y(t), M_z(t))$ arqalı yadrolıq magnitlengenlik, γ arqalı giromagnitlik qatnas belgilengen. $\mathbf{B}(t) = (B_x(t), B_y(t), B_z(t))$ – yadrodaǵı magnit maydanınıń kernewligi (indukciyası). M_0 arqalı sırttan túsirilgen magnit maydanınıń boyındaǵı yadrolıq magnitlengenliktiń stacionar mánisi. $\mathbf{B}$ vektorınıń z qurawshısı turaqlı (B_x) hám waqıtqa baylanıslı ózgeretuǵın $B_z(t)$ qurawshısınıń qosındısı. Bul qosındı shama YMR-signaldıń keńisliktegi ajratılıwı ushın paydalanıladı.

Blox teńlemelerin keltirip shıǵarıw ádewir quramalı matematikalıq másele bolıp tabıladı. Biraq, biz pitkeriw qánigelik jumısınıń ekinshi babında bul teńlemelerdi sanlı sheshiw menen shuǵıllanamız. Sonlıqtan Blox teńlemelerin keltirip shıǵarıwdıń eń ápiwayı usıllarınıń biri menen tanısamız.

Makroskopiyalıq úlgi-degi atom yadrolarınıń sanı júdá úlken. Suwdıń 1 kub santimetrinde shama menen 10^{22} dana vodorod atomlarınıń yadroları bar. Bul yadrolardıń mikroskopiyalıq magnitlik dipolleri pútkilliy (tolıq) tártipsiz jaylasqan. Oyımızda mınaday eksperiment ótkeremiz: qısqa waqıttıń ishinde turaqlı B_0 magnit maydanın túsiremez; bunday jaǵdayda ^1H yadrolarınıń spinleri ($1/2$ ge teń) B_0 maydanınıń baǵıtında statistikalıq tarqalıwǵa ushıraydı. Yarım maydannıń baǵıtına qaray, al ekinshi yarım maydannıń baǵıtına qarama-qarsı baǵıtta baǵıtlanadı. Biraq bunday jaǵdayda spinlik sistema qorshaǵan ortalıq penen jıllılıq teń salmaqlıǵında turmaydı. N^+ arqalı z-qurawshısı I_z maydan B_0 dıń baǵıtına

parallel bolǵan spinlerdiń sanı I di belgileymiz. Al N^- arqalı maydannıń baǵıtına qarama qarsı baǵıtlanǵan spinlerdi belgileymiz. Qorshaǵan ortalıq penen jıllılıq teń salmaqlıǵı ornaǵan halda N^- menen N^+ arasındadıǵı qatnas Bolcman qatnasına baǵınadı dep esaplasaǵ

$$\frac{N^-}{N^+} = e^{-\Delta E/kT}$$

ańlatpasına iye bolamız. Bul ańlatpada k arqalı Bolcman turaqlısı, al T arqalı absolyut temperatura belgilengen.

Bunday jaǵdayda kishi energiyaǵa iye qáddi kóbirek toltırıladı hám sonlıqtan spinlerdiń kópshiligi sırttan túsirilgen maydan B_0 diń baǵıtına parallel bolıp jaylasadı. Ójire temperaturalarında hám 1 T shamasındadıǵı maydanlardı qáddilerdiń toltırılıwlarındaǵı salıstırmaı ayırma shama menen 10^6 ǵa teń. Biraq bul úlken emes shama 1 sm zattaǵı maydan baǵıtında baǵıtlanǵan spinlerdiń sanınıń maydanǵa qarama-qarsı baǵıtlanǵan spinlerdiń sanınan 10 ese úlken ekenligin bildiredi. Sonlıqtan bunday jaǵdayda makroskopiyalıq magnitlengenlikti ólshewdiń múmkinshiligi tuwıladı.

Termodinamikalıq teń salmaqlıq halında qosındı makroskopiyalıq magnitlengenlik M sırtqı maydan B_0 diń baǵıtına parallel. Ójire temperaturaları ushın magnitlengenliktiń shaması M_0 di tómendegidey ańlatpanıń járdeminde alıw múmkin:

$$M_0 = \frac{N h^2 \gamma^2 I(I+1)}{3kT} B_0.$$

Bul ańlatpada $N = N^+ + N^-$ arqalı kólem birligindegi yadrolıq spinlerdiń tolıq sanı belgilengen. Bul formuladan makroskopiyalıq magnitlengenliktiń magnit maydanınıń kernewligi B_0 hám giromagnitlik γ nıń artıwı menen artatuǵınlıǵı, al temperatura T nıń joqarılawı menen kemeyetuǵınlıǵı kórinip tur. Magnitlengenlik M nıń usınday qásiyeti yadrolıq magnitlik rezonans baqlanatuǵın effektlerdiń kópshiligin anıqlaydı.

Spinlik sistema menen qorshaǵan ortalıq (hátte suyıqlıq bolǵan qorshaǵan ortalıqtı da reshetka dep atawǵa boladı) arasındadıǵı jıllılıq teń salmaqlıǵı ornatuǵın waqıt spin-reshetkalıq relaksaciya waqıtı sıpatında anıqlanadı. Bul process teń salmaqlıqtıń ornawı processin (yaǵnıy magnitlengenliktiń z-qurawshısı M_z tiń teń salmaqlıq mánisi M_0 ge jaqınlawı, spinlik sistemada bunday teń salmaqlıq uzaq waqıttıń ótiwi menen júzege keledi) táriyipleydi. Teń salmaqlıq magnitlengenlik sırtqı magnit maydanı B_0 diń baǵıtında ornaydı, sonlıqtan spin-reshetkalıq relaksaciyanı boylıq relaksaciya dep te ataydı.

Yadrolıq magnitlik rezonans qubılısı ashılıwdan-aq Feliks Blox klassikalıq fizikanıń nızamları tiykarında magnitlengenlik $M = (M_x, M_y, M_z)$ nıń qásiyetlerin óziniń atı menen atalatuǵın differenciallıq teńlemeler sisteması túrinde táriyipleıdi (joqarıda keltirildi).

Blox teńlemeleri jetkilikli dárejede ápiwayı túrde tiykarǵı eksperimentallıq maǵlıwmatlardı táriyipleı aladı:

1). Eger dáslepki waqıtları magnitlengenlik penen sırtqı magnit maydanınıń baǵıtları bir birine parallel bolmasa, onda magnitlengenlik sırttan túsirilgen magnit maydanınıń átirapında precessiyaǵa ushıraydı.

2) Qozdırıwshı tásir tiye baslaǵannan keyin jetkilikli dárejedege waqıt ótkennen keyin sistemada teń salmaqlıq magnitlengenligi ornaydı, bunday jaǵdayda M_z magnitlengenliktiń magnit maydanınıń baǵıtındaǵı qurawshısı M_0 shamasına teń, al sırtqı magnit maydanınıń baǵıtına perpendikulyar bolǵan kóldeneń qurawshısı nolge teń. M_z shamasınıń teń salmaqlıq M_0 shamasına eksponenciallıq jaqınlasıwı

$$\frac{dM_z}{dt} = \frac{M_0 - M_z}{T_1}$$

ańlatpasınıń járdeminde táriyiplenedi. T_1 turaqlısı boylıq relaksaciya waqıtı yamasa spin-reshetkalıq relaksaciya waqıtı dep ataladı. Usıǵan sáykes kóldeneń magnitlengenliktiń ıdıraw processı M_x hám M_y ushın jazılǵan teńlemelerdiń járdeminde táriyiplenedi:

$$\frac{dM_x}{dt} = -\frac{M_x}{T_2}, \quad \frac{dM_y}{dt} = -\frac{M_y}{T_2}.$$

Biz T_2 arqalı kóldeneń relaksaciya waqıtınıń belgilengenligin atap ótemiz.

Relaksaciya processin esapqa almaǵanda magnit maydanındaǵı magnitleniw processin táriyiplewshi klassikalıq qozǵalıstıń teńlemesi

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma_1(\mathbf{B} \times \mathbf{M})$$

túrine iye boladı.

Blox teńlemeleri relaksaciyalıq qosılıwshılar teńlemelerine teńlemelerdiń oń bólimleri túrindegi fenomenologiyalıq kirgiziw jolı menen alınadı (teńlemeler joqarıda keltirilgen).

Kópshilik yadrolıq magnitlik rezonans eksperimentinde statikalıq magnit maydanı $\mathbf{B}_0$ menen bir qatarda jiyiligi ω ǵa teń bolǵan radio jiyilikli ózgermeli maydan da boladı. Onıń magnitlik qurawshısı maydan $\mathbf{B}_0$ ge perpendikulyar (mısalı x baǵıtındaǵı) hám belgili bir jiyilikte oscillyaciyalanadı. Bul jiyiliktiń mánisi sırtqı magnit maydanı $\mathbf{B}_0$ diń jiyiliginen kishi. Sızıqlıq polarizaciyalanǵan ózgermeli magnit maydanın eki qurawshıǵa jiklew múmkin. Olardı bir birine qarama-qarsı baǵıtlarda $\pm\omega$ cikllıq jiyiligi menen aylanadı dep kóz aldǵa keltiriw múmkin. z kósheriniń dógerindegi aylanıw jiyiligin ω_1 arqalı belgileymiz. Usıǵan sıykes koordinatalardı túrlendiriw arqalı teńlemelerdi tek formallıq jaqtan ápiwayılastırıp ǵana qoymay, olardı kórgizbeli túrge alıp keliw múmkin.

Keńisliktegi magnitleniw vektorınıń quramalı qozǵalıstıń eki qozǵalıstıń qosındısı túrinde kórsetiw múmkin: aylanıwshı koordinatalar sistemasındaǵı qozǵalıstı hám usı koordinatalar sistemasınıń keńislikte belgilenip alınǵan laboratoriyalıq koordinatalar sistemasındaǵı qozǵalıstı. Ádette aylanıw jiyiligin radio jiyilikli maydannıń jiyiligine teń etip aladı: $\omega_1 = \omega$. Sebebi, bul jaǵdayda aylanıwshı koordinatalar sistemasındaǵı B tınıshlıqta turadı (qozǵalmaydı). x baǵıtındaǵı magnitlengenliktiń kogerentli qurawshısını $M_{x'}$ arqalı, al y' kósheri baǵıtında 90° qa jılısqanın $M_{y'}$ arqalı belgileymiz:

$$M_{x'} = M_x \cos \omega t - M_y \sin \omega t,$$

$$M_{y'} = M_x \sin \omega t + M_y \cos \omega t.$$

Blox teńlemesi aylanıwshı sistemada tómendegidey túrge iye boladı:

$$\begin{aligned} \frac{dM_{x'}}{dt} &= (\omega_1 - \omega)M_{y'} - \frac{M_{x'}}{T_2}, \\ \frac{dM_{y'}}{dt} &= -(\omega_1 - \omega)M_{x'} + \gamma_1 B_1 M_z - \frac{M_{y'}}{T_2}, \\ \frac{dM_z}{dt} &= -\gamma_1 B_1 M_{y'} + \frac{M_0 - M_z}{T_1}. \end{aligned}$$

Blox teńlemelerin matricalıq formada da jazıw múmkin:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{T_2} & \gamma B_z & -\gamma B_y \\ -\gamma B_z & -\frac{1}{T_2} & \gamma B_x \\ \gamma B_y & -\gamma B_x & -\frac{1}{T_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_x \\ M_y \\ M_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{M_0}{T_1} \end{pmatrix}$$

Biz $T_1, T_2 \rightarrow \infty$ bolǵan shek ushın (yaǵnıy boylıq hám kóldeneń relaksaciya joq) Blox teńlemeleriniń analitikalıq sheshimin kórsete alamız. Bunday jaǵdayda hám z kósheriniń baǵıtındaǵı turaqlı magnit maydanı $B(t) = (0, 0, B_0)$ orın aladı hám Blox teńlemeleriniń sheshimleri tómendegidey túrge enedi:

$$M_{xy}(t) = M_{xy}(0)e^{-i\gamma B_0 t},$$

$$M_z(t) = M_0 = \text{const.}$$

Demek, kóldeneń magnitlengenlik bolǵan M_{xy} shaması z kósheriniń átirapında $\omega_0 = \gamma B_0$ jiyiligi menen aylanadı eken. Boylıq magnitlengenlik M_z waqıtqa baylanıslı ózgermeydi. Eger Ω jiyiligi menen aylanatuǵın aylanıwshı koordinatalar sistemasına ótsek (bunday

jiyiliktı sırttan túsirilgen ózgermeli maydannıń jiyiligine teń etip alıw múmkin), onda sheshimdi bılayınsha kórsetiw múmkin:

$$\begin{aligned}M'_z(t) &= M_z(t), \\ M'_{xy} &= e^{+i\Omega t} M_{xy}(t).\end{aligned}$$

5-§. Juwmaqlar hám máseleniń qoyılıwı

Biz joqarıda yadrolıq magnitlik rezonanstıń fizikalıq tiykarların hám onıń fizika, ximiya, biologiyadaǵı áhmiyeti haqqında aytıp óttik hám tiykarǵı dıqqattı tómendegidey jaǵdaylarǵa qarattıq:

Barlıq ańlatpalardı SGS sistemasında jazamız.

Erkin spin ushın rezonanslıq jiyilik $\omega_0 = \gamma B_0$ shamasına teń.

Ápiwayı túrde jazǵanda (1)-Blox teńlemeleri

$$\begin{aligned}\frac{dM_x}{dt} &= \gamma(M \times B)_x - \frac{M_x}{T_2}, \\ \frac{dM_y}{dt} &= \gamma(M \times B)_y - \frac{M_y}{T_2}, \\ \frac{dM_z}{dt} &= \gamma(M \times B)_z - \frac{M_0 - M_z}{T_1}\end{aligned} \tag{2}$$

túrine iye.

Rezonanslıq sıızıqtıń yarım keńligi (quwattı jutıw piginıń biyikliginiń teń jartısındaǵı keńlik) $(\Delta\omega)_{1/2} = \frac{1}{T_2}$.

Joqarıda keltirilgendey qatnaslardı esapqa alǵan halda házirgi zaman oqıw laboratoriyasında ayırım zatlar ushın yadrolıq magnitlik rezonanstı baqlaw hám YMR qubılısına baylanıslı bolǵan ayırım matematikalıq ańlatpalardı (mısalı Blox teńlemelerin) kompyuterlerdiń járdeminde kórgizbeli túrde sanlı sheshiw múmkinshilikleri jaratılǵan.

Usı jaǵdaydı esapqa alǵan halda pitkeriw qánigelik jumısında vodorodtıń (protonlar) hám ftordıń yadrolarınıń polistirol, glicerin hám teflon sıyaqlı zatlardaǵı yadrolıq magnitlik rezonanslıq signalları izertleniledi. Magnit maydanınıń kernewliginiń shaması teslametr menen ólshengen.

II bab. Alınğan sanlı hám eksperimentallıq nátiyjeler hám olardıń tallanıwı

5-§. Sanlı modellestiriw

Biz birinshi gezekte Blox teńlemelerinen paydalanıp sáykes nátiyjelerdi sanlı usıllar menen alıwǵa tırısamız.

Biz Blox teńlemelerin skalyar túrdegi R.Richards paydalanǵan belgilewlerde jazamız [23]:

$$\begin{aligned}\frac{dM_x}{dt} &= \gamma(M_y H_0 + M_z H_1 \sin \omega t) - \frac{M_x}{T_2}, \\ \frac{dM_y}{dt} &= \gamma(M_z H_1 \cos \omega t + M_x H_0) - \frac{M_y}{T_2}, \\ \frac{dM_z}{dt} &= -\gamma(M_x H_1 \sin \omega t + M_y H_1 \cos \omega t) - \frac{M_0 - M_z}{T_1}.\end{aligned}\quad (3)$$

Bul teńlemelerde bizdi qızıqtıratuǵın magnit maydanınıń vektorı $\mathbf{H}$ eki qurawshıdan turadı: H_0 kúshli maydan z kósheri baǵıtında jaylasqan, al H_1 ázzi maydan (x, y) tegisliginde ω múyeshlik jiyiligi menen aylanadı.

$\mathbf{H}$ tıń kósherler boyınsha qurawshıları:

$$\begin{aligned}H_x &= H_1 \cos \omega t, \\ H_y &= -H_1 \sin \omega t, \\ H_z &= H_0.\end{aligned}$$

(3)-teńlemelerdiń stacionar sheshimleri úlken qızıǵıwshılıqlardı payda etedi. Bul sheshimler mınaday túrge iye:

M_z turaqlı shama, al $\mathbf{M}$ vektorınıń kóldeneń qurawshıları H_1 maydanı menen (x, y) tegisliginde aylanadı. Eger χ_0 magnitlik sińirgishlikti

$$\chi_0 = \frac{M_0}{H_0}$$

qatnası túrinde anıqlaytuǵın bolsaq, onda (3)-Blox teńlemeleriniń sheshimleri mınaday túrge iye [G.E.Pake. Fundamentals of NMR Absorption. Amer. J. Phys. 18, 438, 473 (1950).]:

$$M_z = \chi_0 H_0 \frac{1 + T_2^2(\omega_0 - \omega)}{1 + T_2^2(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2}, \quad (4)$$

$$M_x = \frac{1}{2} \chi_0 H_0 T_2 \frac{(2H_1 \cos \omega t) T_2(\omega_0 - \omega) + 2H_1 \sin \omega t}{1 + T_2^2(\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2}. \quad (5)$$

(4)-formuladan M_z shamasınıń mánisiniń waqıttan ǵárezsiz hám jiyilik ω dan ǵárezli ekenligin kórinip tur. Al M_x tıń mánisi waqıt t dan ǵárezli.

Biz (4)- hám (5)-formulalar boyınsha γ , H_1 , H_2 , T_1 , T_2 , χ_0 diń ıqtıyarlı mánisleri ushın Mathematica universallıq kompyuterlik algebra sistemasınıń járdeminde grafiklerdi sızıwımız múmkin. Onıń ushın mına túrdegi programmanı jazamız:

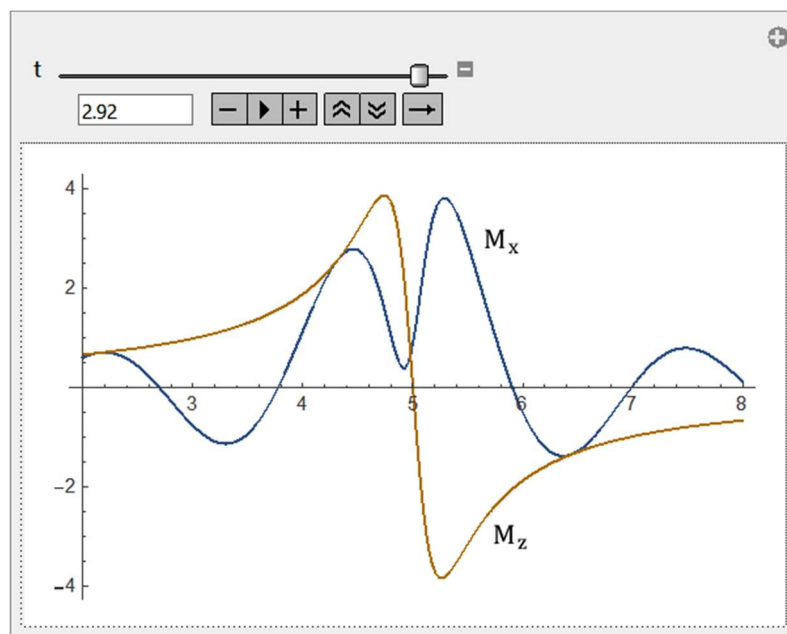
$\gamma = 1$; $H_0 = 1$; $\chi = 2$; $\omega_0 = 5$; $T_1 = 2$; $T_2 = 30$; $H_1 = 1$;

Manipulate[
[варьировать]

Plot[$\left\{ \frac{1}{2} \chi H_0 T_2 \frac{(2 H_1 \cos[\omega t]) T_2 (\omega_0 - \omega) + 2 H_1 \sin[\omega t]}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2}, \chi H_0 \frac{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)}{1 + T_2^2 (\omega_0 - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2} \right\}$,
[график функции]

{ ω , 2, 8}], { t , 0, 3}]

Bul programmada waqıt t nıń mánisi Manipulate komandasınıń járdeminde qol menen ózgeriledi (0 den 3 ke shekem). Nátiyjede tómende kórsetilgendeı grafikti alamız (súwrette $t = 2.92$):

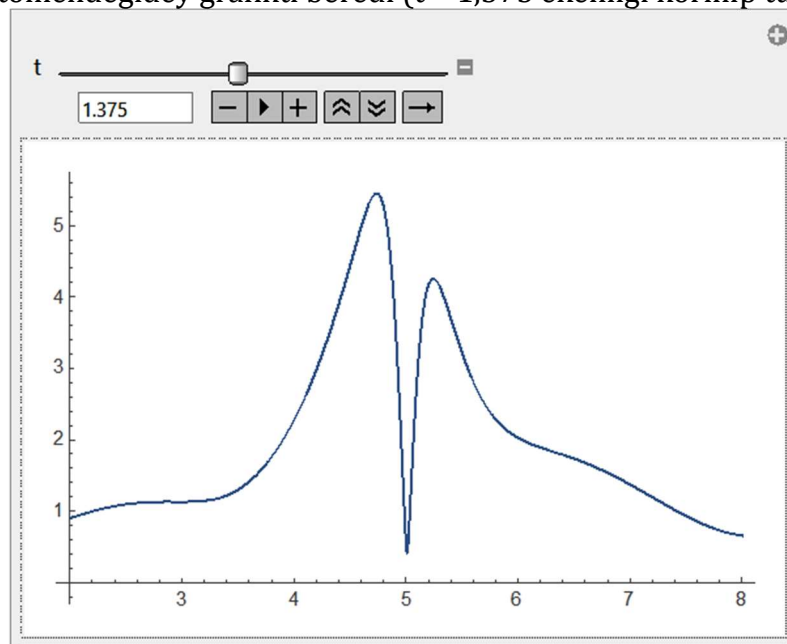


Endi biz $\sqrt{M_z^2 + M_x^2}$ moduliniń waqıttan gárezliginiń grafigin dúziwimiz múmkin. Sáykes programma tómendegideı túrge iye:

Manipulate [
[варьировать]

$$\text{Plot} \left[\sqrt{\left(\frac{1}{2} \chi H_0 T_2 \frac{(2 H_1 \cos[\omega t]) T_2 (\omega \theta - \omega) + 2 H_1 \sin[\omega t]}{1 + T_2^2 (\omega \theta - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2} \right)^2 + \left(\chi H_0 \frac{1 + T_2^2 (\omega \theta - \omega)}{1 + T_2^2 (\omega \theta - \omega)^2 + \gamma^2 H_1^2 T_1 T_2} \right)^2}, \right. \\ \left. \{\omega, 2, 8\}, \{t, \theta, 3\} \right]$$

Kompyuter tómendegideı grafikti beredi ($t = 1.375$ ekenligi kórinip tur):



Aylanıwshı sistemadağı Blox teńlemelerin modellestiremiz.

Bul demonstraciya yadrolıq magnitlik rezonans processindegi magnitlengenlik vektorı M niń dinamikasını vizuallastıradı. Bul processte paramagnitlik bólekshelerdiń ansambliniń makroskopiyalıq magnitlengenligi M ge statikalıq magnit maydanı B_0 menen usı B_0 diń dógerinde ω jiyiligi menen aylanatuǵın B_1 magnit maydanı tásir etedi. M vektorınıń qozǵalısqı Blox teńlemeleriniń járdeminde esaplanadı. B_1 magnit maydanınıń magnitlengenlik M ge tásiiri aylanıw jiyiligi ω erkin larmor precessiyasınıń jiyiligi $\omega_0 = \gamma|B_0|$ (yaǵnıy $\omega - \omega_0 = 0$).

Kóp sanlı qızıqlı jaǵdaylar zakladkalar túrinde kórsetilgen. Olardı joqarıdaǵı on múyeshtegi kishkene atanaqtı aktivlestiriw arqalı iske qosıw múmkin. Mısalı:

- Erkin larmor precessiyası. Bunday precessiya $B_1 = 0$ bolǵan jaǵdayda júzege keledi hám bunday jaǵdayda magnitlengenlik vektorı M B_0 diń átirapında Larmor jiyiligi menen precessiyalanadı.

- $\pi/2$ -impuls. Bunday impuls ushın B_1 vektorı (0 ge qoyıw) hám onıń ushın B_1 maydanı $\tau_{\pi/2}$ waqıtqa qosılǵan. Sonlıqtan $\Omega_R \tau_{\pi/2} = \pi/2$. Nátiyjede magnitlengenlik vektorı xy tegisliginde $\pi/2$ múyeshke burıladı.

- π -impuls. Bunday impuls ushın B_1 maydanı larmor jiyiligi menen aylanadı (0 ge qoyıw) hám usı B_1 maydanı τ_π waqıtqa qosıladı. Sonlıqtan $\Omega_R \tau_\pi = \pi$. Nátiyjede magnitlengenlik z kósheriniń baǵıtında π múyeshke burıladı.

- Magnitlengenlik stacionar halına jetetuǵınday relaksaciyaǵa iye magnitlik rezonans. Bunday jaǵdayda $\omega - \omega_0$ shaması menen operaciyalardı orınlaw múmkin. Eger $\omega \ll \omega_0$ yamasa $\omega \gg \omega_0$ teńsizlikleri orınlanatuǵın bolsa, onda B_1 maydanına baylanıstıń shaması úlken emes al qalıplesken magnitlengenlik z kósheriniń baǵıtındaǵı teń salmaqlıq magnitlengenlikke jaqın. Biraq, $\omega \approx \omega_0$ teńligi orınlanǵan jaǵdayda qalıplesken hal z kósherinen alısta júzege keledi.

Biz Blox teńlemesine mınaday shamalardı kirgizemiz:

1. Aylanıwshı magnit maydanı boyınsha mınaday maǵlıwmatlar kirgiziledi:

ω jiyiligi ózgeriledi (ω_0 berilgen).

Koordinatalar sistemasınıń aylanıw jiyiligi Ω_R .

2. Relaksaciyaǵa baylanıslı mınaday shamalar:

Boylıq relaksaciyanıń tezligi.

Kóldeneń relaksaciyanıń tezligi.

3. Relaksaciya ushın teń salmaqlıq mánisi.

$t = 0$ waqıt momentindegi baslanǵısh magnitlengenlik:

M boyınsha norma (usı vektordıń uzınlıǵı ıqtıyarlı túrde beriledi).

M ushın zenitlik múyesh (vertikal baǵıt penen usı vektor arasındaǵı múyesh).

M ushın azimutallıq múyesh (gorizont baǵıtındaǵı múyesh).

4. Waqıttıń ótiwi avtomat túrde ózgeriledi (waqıt sıpatında Larmor cikli ushın 10 ǵa shekemgi sanlar berilgen).

Programma tómendegidey túrge iye:

```
CrossProduct[{a1_,a2_,a3_},{b1_,b2_,b3_}]:={-a3 b2+a2 b3,a3 b1-a1 b3,-a2 b1+a1 b2}
```

```
Manipulate[
```

```
Module[{u0,v0,w0,ω,B0,B1,γB,BlochEq,eqs,sol,blochvector,ΩRmin},
```

```
If[time>duration,time=duration];
```

```
If[γ2<γ1,γ2=γ1]; ΩRmin=10-12;
```

```
u0=M0norm Sin[M0theta π/180.] Cos[M0phi π/180.];
```

```
v0=M0norm Sin[M0theta π/180.] Sin[M0phi π/180.];
```

```
w0=M0norm Cos[M0theta π/180.];
```

```
ω=2π(1+detuning); B0={0,0,1};
```

```
B1=If[ΩR==0,{ΩRmin Cos[ω t],ΩRmin Sin[ω t],0},{ΩR Cos[ω t],ΩR Sin[ω t],0}];
```

```
γB=B0+B1;
```

```

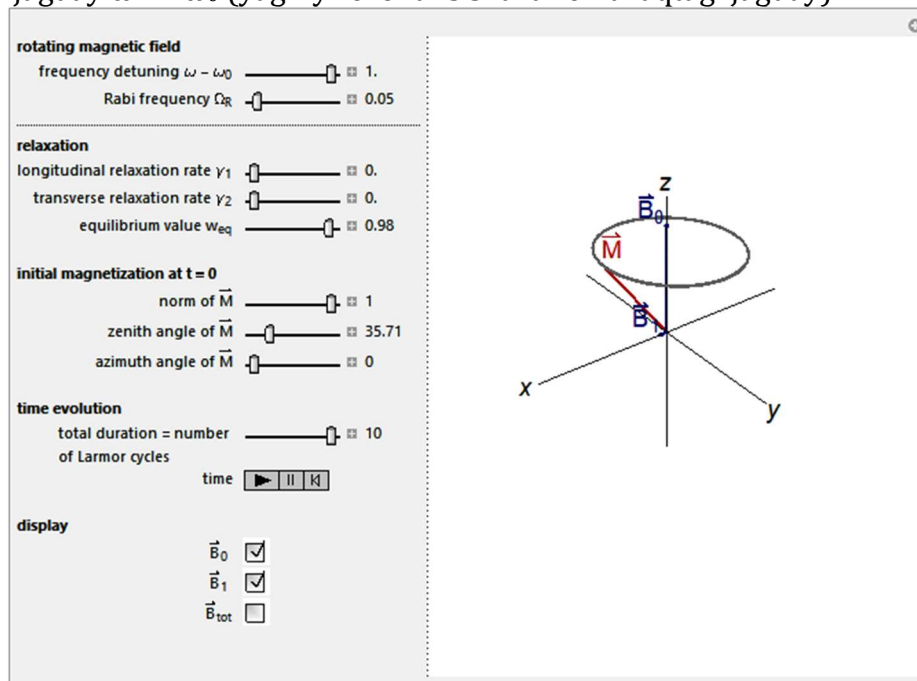
BlochEq=Thread[{u'[t],v'[t],w'[t]}==2π (CrossProduct[γB,{u[t],v[t],w[t]}]-{γ2 u[t],
γ2 v[t],γ1 (w[t]-weq)})];
eqs=Join[BlochEq,{u[0]==u0,v[0]==v0,w[0]==w0}];
sol=NDSolve[eqs,{u,v,w},{t,0,duration}]; blochvector={u[t],v[t],w[t]}/.First[sol];
Show[{ParametricPlot3D[blochvector,{t,0,time},PlotStyle->Gray,PerformanceGoal-
>"Quality",AxesLabel-
>{"x","y","z"},Graphics3D[{Thickness[0.006],PointSize[0.012],Red,Line[{0,0,0},blochvector],Point[blochvector],Text[Text[" $\vec{M}$ "],blochvector,{-1,-1}],Darker[Blue],If[B0disp,{Line[{0,0,0},B0],Point[B0],Text[Text[" $\vec{B}_0$ "],B0,{1,-1}]],{]],If[B1disp,{Line[{0,0,0},B1],Point[B1],Text[Text[" $\vec{B}_1$ "],B1,{1,-1}]],{]],If[Bdisp,{Line[{0,0,0},B0+B1],Point[B0+B1],Text[Text[" $\vec{B}$ "],B0+B1,{1,-1}]],{}}]/.t->time], Graphics3D[{Line[ps[{-1,0,0},{1,0,0}]],Line[ps[{0,-1,0},{0,1,0}]],Line[ps[{0,0,-1},{0,0,1}]],Text[Text@Style["x",Italic,{lp,0,0}],Text[Text@Style["y",Italic,{0,lp,0}],Text[Text@Style["z",Italic,{0,0,lp}]]/.{ps->1.25,lp->1.35}]],BaseStyle->{18,"Label"},ImageSize->1.1{300,400},PlotRange->1.2,Boxed->False,Axes->False,ViewPoint->{1.5,2.0,1.6}]],Style["Aylaniwshi magnit maydani",Bold],{{detuning,0,Row[{"ω jiyiligin o'zgartiw ",Subscript["ω",0]}]],-1,1,.01,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny},{{ΩR,0.05,"Koordinatar sistemasinin' aylaniw jiyiligi ΩR"},0,1,0.05,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny}, Delimiter, Style["Relaksaciya",Bold],{{γ1,0,Row[{"Boyliq relaksaciya tezligi ",Subscript["γ",1]}]],0,0.5,.01,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny},{{γ2,0,Row[{"Ko'ldenen' relaksaciya tezligi ",Subscript["γ",2]}]],0,0.5,.01,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny},{{weq,1,Row[{"Ten' salmaqli'q ma'nisi ",Subscript["w","eq"]}]],0,1,.01,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny}, Delimiter, Style["t = 0 momenttegi baslang'ish magnitlengenlik",Bold],{{M0norm,1," $\vec{M}$  ushin norma (uzinliq)"},0,1,.01,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny},{{M0theta,0," $\vec{M}$  ushin zenitlik mu'yes"},0,180,.01,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny},{{M0phi,0," $\vec{M}$  ushin azimutalliq mu'yesh"},0,360,.01,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny}, Delimiter, Style["Waqittin' o'tiwi",Bold],{{duration,10,"uliwmaliq dawam etiw = san \n (dana Larmor cikli)"},1,10,Appearance->"Labeled",ImageSize->Tiny},{{time,duration,"Waqit"},0.01,duration,.01,ControlType->Trigger,DefaultDuration->Round[duration],DisplayAllSteps->True,ImageSize->Tiny}, Delimiter, Style["Displey",Bold], {{B0disp,True,"B0"},{False,True}}, {{B1disp,True,"B1"},{False,True}}, {{Bdisp,False,"Btot"},{False,True}},Bookmarks->{ "free Larmor precession":>{duration=10,M0norm=1,M0theta=30,M0phi=0,weq=1,time=63,γ1=0,γ2=0,ΩR=0,detuning=0,B0disp=True,B1disp=False,Bdisp=False},"π/2-pulse":>{duration=5,M0norm=1,M0theta=0,M0phi=0,weq=1,time=31.5`,γ1=0,γ2=0,ΩR=0.05`,detuning=0,B0disp=True,B1disp=True,Bdisp=False},"π-pulse":>{duration=10,M0norm=1,M0theta=0,M0phi=0,weq=1,time=63,γ1=0,γ2=0,ΩR=0.05`,detuning=0,B0disp=True,B1disp=True,Bdisp=False},"resonance with relaxation":>{duration=10,M0norm=1,M0theta=0,M0phi=0,weq=1,time=63,γ1=0.12,γ2=0.12,ΩR=0.1`,detuning=0,B0disp=True,B1disp=True,Bdisp=False},"adiabatic following":>{duration=10,M0norm=1,M0theta=0,M0phi=0,weq=1,time=63,γ1=0,γ2=0,ΩR=

```

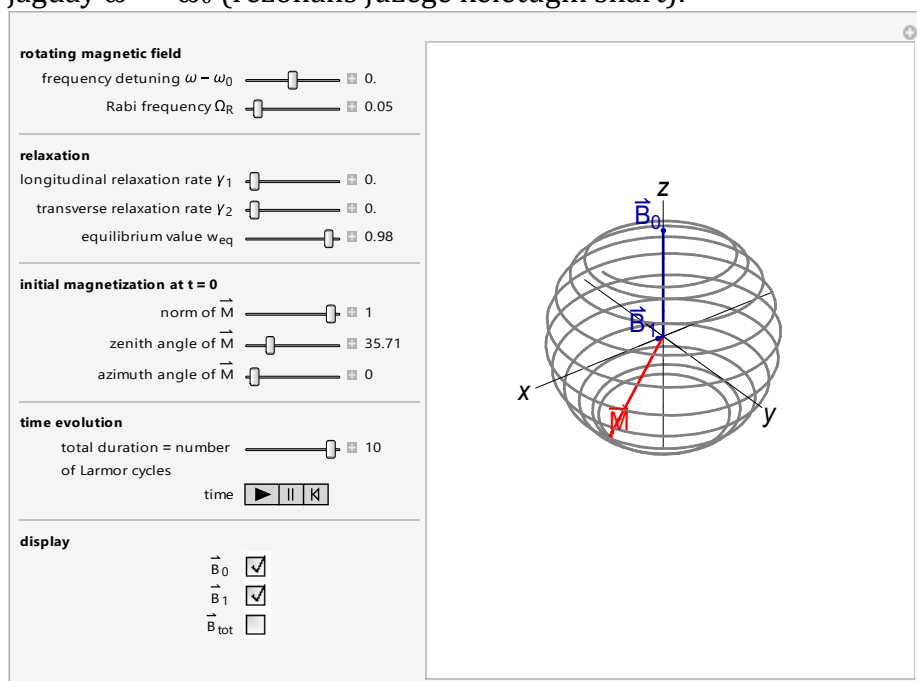
0.1, detuning = -0.9, B0disp = False, B1disp = False, Bdisp = True}},
SaveDefinitions -> True]

Programma boyınsha esaplawlar júrgiziwdiń nátiyjesinde kompyuter ekranında mınaday súwret shıǵadı:

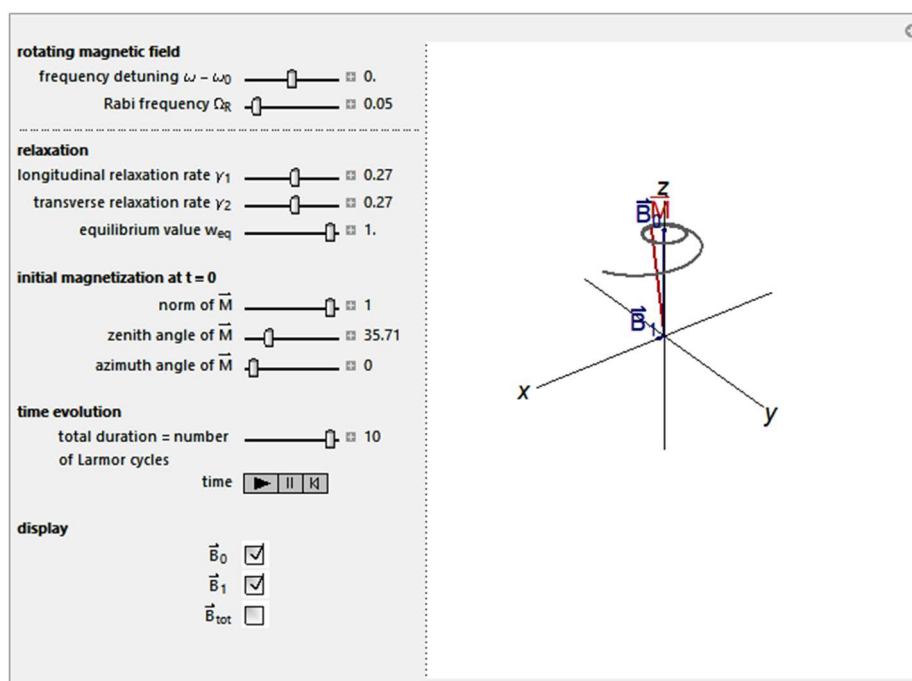
Birinshi jaǵday $\omega \gg \omega_0$ (yaǵnıy rezonans shártinen uzaqtaǵı jaǵday):



Ekinshi jaǵday $\omega \gg \omega_0$ (rezonans júzege keletuǵın shárt):



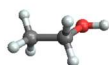
Úshinshi jaǵday – sóniw orın alatuǵın jaǵday



Etanol ushın yadrolıq magnitlik rezonans spektri

Yadrolıq magnitlik rezonans spektroskopiyası magnit maydanındagı protonlıq spinlerdiń radio jıylıqlı zeeman ótiwlerin ólshewge múmkinshilik beredi. Kópshilik jaǵdaylarda belgili bir jıylıqlıqlarda (mısalı, 60 MHz) magnit maydanınıń shamasın rezonans shárti orınlanatuǵın jaǵday arqalı ótkeriw qolaylı. Joqarıda gáp etilgenindey rezonans shárti ximiyalıq awısıwǵa (jılıwǵa, bir biri menen ekvivalent bolmaǵan protonlarǵa)) kúshli baylanıslı. Klassikalıq misal sıpatında etanoldıń molekulasın kórsetiw múmkin. Bunday molekulada vodorod atomı hár ximiyalıq jaqtan qıylı bolǵan úsh halda tura aladı. Sonlıqtan yadrolıq magnitlik rezonanstıń úsh piki intensivlikleri boyınsha 3:2:1 qatnasında boladı. Bunday jaǵdayda δ shaması (ximiyalıq quramınıń bólshek awısıwı) sáykes parametrdiń ornın iyeleydi. Qolaylı standart ushın $\delta = 0$ teńligi saylap alınadı. Ádette δ -shkalasın kalibrovkalaw ushın azmaz qosımtalar qosıladı.

Programma mınaday túrge iye:



```
ethanol=
spin[x_,y_]:=Graphics[{Thickness[.02],Blue,Arrowheads[.08],Arrow[{x,y},{x,y+20*Dynamic[Refresh[RandomChoice[{-1,1}],UpdateInterval->.25]]}]}]}
j=.15;
sp[0]={};
sp[3]={spin[19,52],spin[32,91],spin[39,48]};
sp[2]={spin[80,82],spin[86,36]};
sp[1]=spin[121,78];
δ1=-4.85;δ2=-3.75;δ3=-1.25;
gr[h_,r_]:=Boole[δ1-r-1<h<δ1+r-1]+2Boole[δ2-r-1-1.3j<h<δ2+r-1+1.5j]+3 Boole[δ3-r-1-j<h<δ3+r-1+j]
proton=Graphics[Text[Style["\[UpArrow] \[DownArrow]",16,Blue,Bold]]];
eth[h_,r_,s_]:=Show[ethanol,sp[s*gr[h,r]],PlotRange->{{0,150},{0,125}},ImageSize->{175,175},Epilog-
```

```

>Which[gr[h,r]==2&&s==1,{Inset[proton,{20,51}],Inset[proton,{32,90}],Inset[proton,{40,47}]},
gr[h,r]==3&&
s==1,{Inset[proton,{81,81}],Inset[proton,{87,35}]},True,Inset[Graphics[]]]
f[δ,r_]:=1/(π r) 1/((δ-δ1)2+r2)+1/(π r) .25/((δ-δ2-1.5j)2+r2)+1/(π r) .75/((δ-δ2-.5j)2+r2)+1/(π r) .75/((δ-δ2+.5j)2+r2)+1/(π r) .25/((δ-δ2+1.5j)2+r2)+1/(π r) .75/((δ-δ3-j)2+r2)+1/(π r) 1.5/((δ-δ3)2+r2)+1/(π r) .75/((δ-δ3+j)2+r2)+1/(π r) .05/(δ2+1r2)
spectrum[h,r,s_]:=Plot[f[δ,r]UnitStep[h-δ],{δ,-6,.5},PlotStyle->{Thick,Green},Frame->True,FrameTicks->{{None,None},{{-6,6},{-5,5},{-4,4},{-3,3},{-2,2},{-1,1},{0,0}},None}},FrameLabel->"δ (ppm)",PlotRange->{0,13},AspectRatio->.6,Epilog->Inset[eth[h,r,s],{-2.5,9}]]

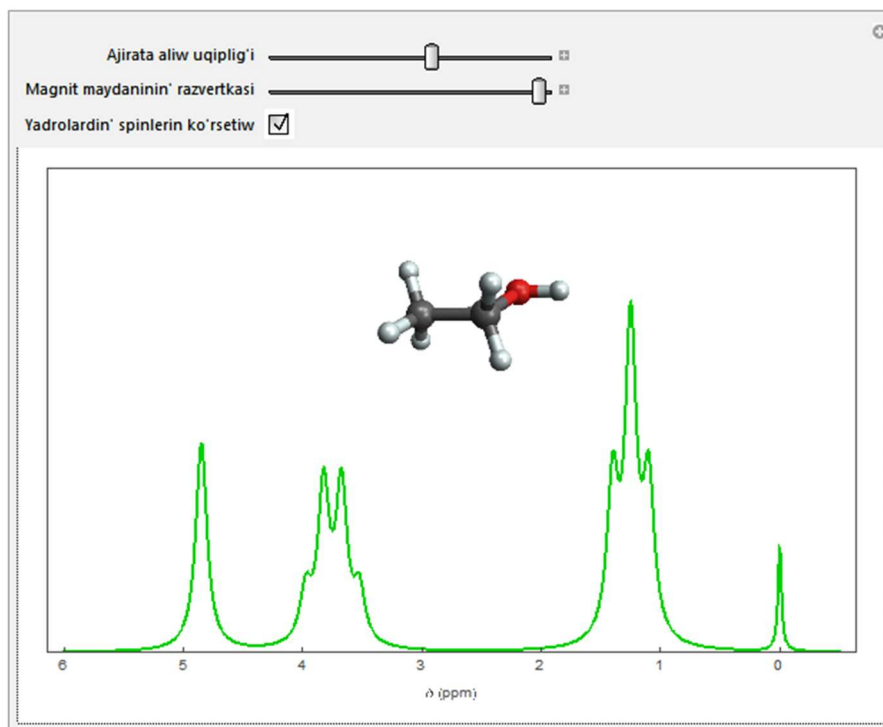
```

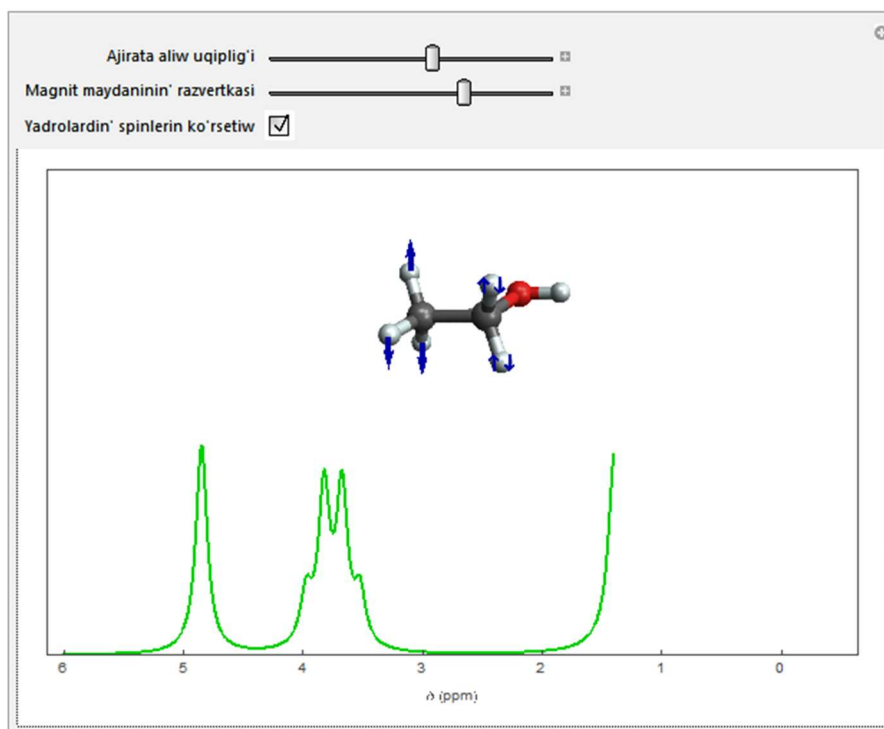
```

Manipulate[ Show[spectrum[h,r,s],ImageSize->{575,375}],
{{r,17.5,"resolution"},7,25}, {{h,-6,"sweep magnetic field"},-6,.5},
{{s,0,"show nuclear spins"},{0,1} ,ControlType->Checkbox},
AutorunSequencing->{2}, TrackedSymbols:>{h,r,s},
ControlPlacement->Top,SaveDefinitions->True]

```

Programma boyinsha esaplawlar mınaday súwretlerdi beredi:





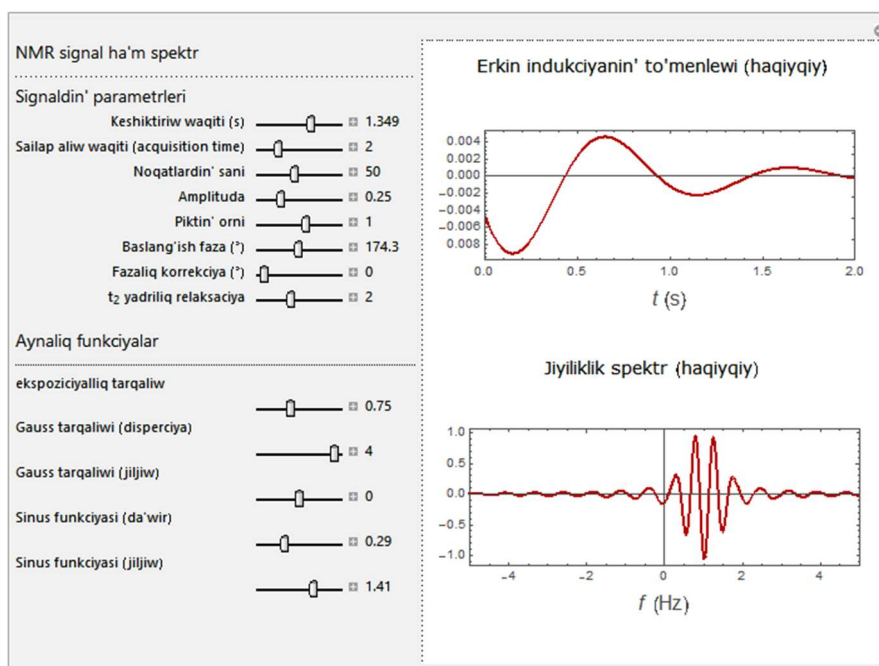
Jeke bir signal

```

Manipulate[Module[{t,t=t0/n;Column[{
  Style["Erkin indukciyanin' to'menlewi (haqiqiy)", "Label", 14],
  Plot[Re[Cos[2 Pi d t+φ] Exp[-(T-b)^2/(2 c)] Exp[-lb T] A Exp[I 2 Pi w0 (T+Td)+I Pi ψ/180]
  Exp[-(T+Td)/T2] Exp[I Pi (ψ-ψc)/180]],{T,0,t0},PlotRange->{{0,t0},All},Frame-
  >True,FrameLabel->Style[Row[{Style["t",Italic]," (s)"}],16],PlotStyle-
  >{Red,AbsoluteThickness[2]},ImageSize->{340,200},AspectRatio->0.35],
  Style["Jiyiliklik spektr (haqiqiy)", "Label", 14],
  Plot[Sum[Re[Cos[2 Pi d k t+φ] Exp[-(k t-b)^2/(2 c)] Exp[-lb k t] A Exp[I 2 Pi (w-w0) (t
  k+Td)+I Pi ψ/180] Exp[-(t k+Td)/T2] Exp[I Pi (ψ-ψc)/180]]
  ,{k,0,n-1}],{w,-5,5},Frame->True,FrameLabel->Style[Row[{Style["f",Italic],"
  (Hz)"}],16],PlotStyle->{Red,AbsoluteThickness[2]},PlotRange->{{-5,5},All},ImageSize-
  >{340,200},AspectRatio->0.35]
  },Alignment->Center,Spacings->1]], Style["NMR signal ha'm spektr",14],
  Delimiter, Style["Signaldin' parametrleri",14],
  {{Td,0,"Keshiktiriw waqiti (s)"},0,2,0.001,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
  {{t0,2,"Sailap aliw waqiti (acquisition time)"},0.01,10,0.01,Appearance->"Labeled",
  ImageSize-> Tiny},
  {{n,50,"Noqatlardin' sani"},10,100,1,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
  {{A,0.25,"Amplituda"},0.01,1,0.01,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
  {{w0,1,"Piktin' ornı"},-5,5,0.1,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
  {{ψ,0,"Baslang'ish faza (°)"},0,360,0.1,Appearance->"Labeled",ImageSize-> Tiny},
  {{ψc,0,"Fazaliq korrekciya (°)"},0,360,0.1,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
  {{T2,2,"t2 yadriqliq relaksaciya"},0.1,5,0.01,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
  Delimiter, Style["Aynaliq funkciyalar",14], Delimiter, "ekspoziciyalliqlıq tarqaliw",
  {{lb,0,""},0,2,0.01,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
  "Gauss tarqaliwi (dispersiya)", {{c,4,""},0.1,4,0.01,Appearance->"Labeled", ImageSize->
  Tiny}, "Gauss tarqaliwi (jiljiw)",

```

{{b,0,""},-10,10,0.1,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
 "Sinus funkciyasi (da'wir)", {{d,0,""},0,1,0.01,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
 "Sinus funkciyasi (jiljiw)", {{φ,0,""},0,2,0.01,Appearance->"Labeled", ImageSize-> Tiny},
 ControlPlacement->Left, SaveDefinitions-> True, AutorunSequencing-> {2,3}]



6-§. Yadrolıq magnitlik rezonanstı úyreniwge arnalğan ekperimentallıq jumıstıń tiykarǵı principi

Jumıstıń máqseti

- Suyıqlıq hám qattı dene úlgeri járdeminde proton hám ftor yadrolarındaǵı yadrolıq magnitlik rezonanstı izertlew.
- Ftor yadrolarındaǵı rezonans sızıqlarınıń keńligin anıqlaw.
- Proton hám ftor ushın g-faktorın anıqlaw.

Teoriyalıq maǵlıwmatlar

Yadrolıq magnitlik rezonanstıń 1945-jılı K.E. Blox (K.E.Bloch) hám E.M. Parsell (E.M.Purcell) tárepinen ashılǵanlıǵı joqarıda aytıp ótildi (qosımsha [24-26] ádebiyatlar da paydalanıldı). Házirgi kúnde yadrolıq magnitlik rezonans ximiya hám biologiyada áhmiyetli standart spektroskopiyalıq metod bolıp esaplanadı. Yadrolıq magnitlik rezonans medicinada «magnitlik rezonanslıq tomografiya» (MRT) dep atalatuǵın klinikalıq diagnozlardı qoyıw ushın arnalğan metod sıpatında rentgen nurları hám ultra ses tolqınlarınıń járdeminde skanerlew metodlarına qosımsha ráwishte qullanıladı.

Bul jumı suyıq hám qattı úlgeride yadrolıq magnitlik rezonans qubılısınıń tiykarların demonstraciyalaydı jáne de spektroskopiyalıq metodlardıń ximiya hám biologiyada qollanıwı haqqındaǵı dástlepki túsiniqlerdi beredi.

Yadrolıq magnitlik rezonans yadronıń magnitlik qásiyetlerine tiykarlangan. I yadrolıq spinge iye bolǵan yadro tómendegi ańlatpadan tabılatuǵın μ magnit momentine iye boladı:

$$\mu = -g\mu_n I \quad (6)$$

μ_n - yadro magnetoni, g - Lande faktori.

Yadroniń magnetlik momenti μ bir tekli magnet maydanı B_0 ға salıstırғanda tek ayırım bağıtlarda ғana orientaciyalanған bolıwı múmkin. Spinniń hár bir orientaciyalıq halına tómendegishe anıqlanatuǵın menshikli energetikalıq qáddiler sáykes keledi:

$$E_k = -g\mu_n B_0 k \quad (7)$$

bul jerde $k = -I, -I + 1, \dots, +I$.

Úlgi B_0 bir tekli magnet maydanǵa jaylastırılǵanda yadroniń spinleri energetikalıq qáddiler boyınsha Bolcmanniń bólistiriw funkciyasına sáykes funksiya boyınsha bólistiriledi:

$$\frac{N_k}{N_{k+1}} = \exp\left(-\frac{E_{k+1} - E_k}{k_B T}\right) \quad (8)$$

k_B - Bolcman turaqlısı, N_k - k -qáddidegi spinler sanı.

Úlgi B_0 bir tekli magnet maydanǵa perpendikulyar bolған ν joqarı jiyilikli B_1 magnet maydanǵa jaylastırılǵanda spinlerdiń qozdırılıwı saldarınan E_k qáddige qońsılǵan bolған energetikalıq qáddiler arasında ótiwler júzege keledi. Bunıń ushın jiyilik ν energiyalıq qáddiler ayırmasına dál sáykes keliwi kerek. Bul rezonans qubılısı dep ataladı.

$\Delta k = 1$ bolған jaǵday ushın tómendegini jaza alamız:

$$h\nu = E_{k+1} - E_k = -g\mu_n B_0 \quad (9)$$

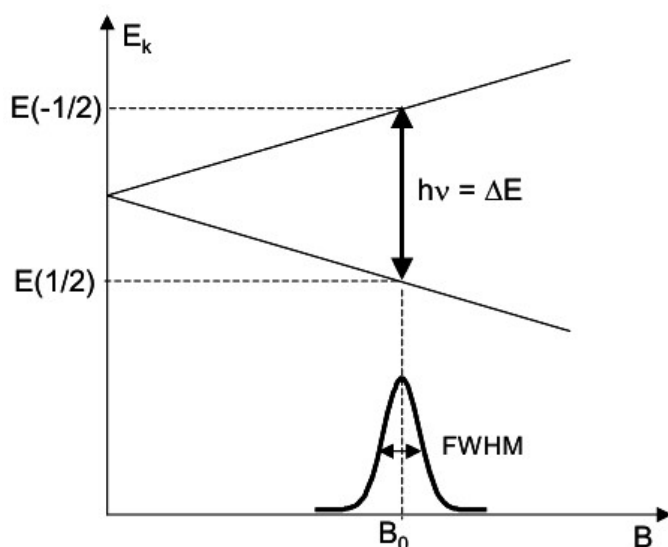
h - Plank turaqlısı.

Bul jumısta vodorod yadrosı (proton) hám ftor yadrosınıń yadrolıq magnetlik rezonans signalları ólshenedi. Olardıń hár biriniń spini $I = 1/2$ ge teń, sonıń ushın olar (7) teńlemege muwapıq B_0 magnet maydanǵa salıstırılǵanda eki múmkin bolған orientaciyaga iye boladı (10-súwret). Bul eki energiyalıq qáddiler arasındaǵı spinlik ótiwlerdi baqlaw ushın, úlgi HF (high frequency) katushka ishindegi bir tekli magnet maydan B_0 ға jaylastırıladı. Qosımsha ráwishte, B_0 bir tekli magnet maydanı eki modulyaciyalanwshı katushkalar járdeminde turaqlı ν jiyilik penen modulyaciyalanadı. Sonıń menen bul dúziliste rezonans signalı magnet maydannan baylanıslı túrde payda etiledi. Hár sapar rezonans shárti (9) orınlanǵanda, spinlik ótiwler nátiyjesinde jutılған energiya HF katushkada registraciyalanadı. Yadrolıq magnetlik rezonans signalı úlgidegi spinler sanı N ға tuwrı proporcional boladı.

Mısal ushın, magnet maydanındaǵı vodorod yadrosı ushın rezonanslıq jiyilik shama menen 42,5 MHz mániske teń boladı. Rezonanslıq jiyiliktiń dál mánisi vodorod atomınıń ximiyalıq ortalıǵına baylanıslı, yaǵnıy oǵan sırtqı magnet maydanı B_0 diń mánisine qosımsha ráwishte jaqın átiraptaǵı elektronlardıń hám yadrolardıń ishki lokallıq maydanları da tásir etedi. Bul qubılıs ximiyalıq jılıw (awısıw) dep ataladı hám yadrolıq magnetlik rezonanstı ximiya hám biologiya ushın áhiymetli spektrallıq izertlew metodlarınıń birine aylantıradı.

Yadrolıq magnetlik rezonanstǵı rezonans sızıǵınıń keńligi yadro átirapındaǵı elementlerdiń tábiyatınan hám temperatura tásirinen ǵárezli boladı. Sızıq keńligin bul faktorlar táhiri sıpatında analiz qılıw hár qıylı úlgilerdiń ximiyalıq hám fizikalıq xarakteristikaları haqqında tolıq maǵlıwmatlardı alıwǵa múmkinshilik beredi. Yarım maksimumnıń tolıq keńligi (10-súwret) ayırım jaǵdaylarda relaksaciya waqtı T_2 ushın ólshem bolıp esaplandı.

$$\Delta B \sim \Delta \nu \sim \frac{1}{T_2} \quad (10)$$



10-súwret. B_0 magnit maydan tásirinde spini $I = 1/2$ ge teń yadronıń energiya qáddileriniń ajıralıwı. Yadrolıq magnitlik rezonans spektrinde baqlanǵan bir sıızıqta yarım maksimumdaǵı tolıq keńlik (YMTK) ($FWHM$) anıqlanıwı múmkin.

7-§. Eksperimentlerdi orınlaw ushın arnalǵan laboratoriyalıq dúzilis hám onıń bayanlaması

Jumıstı orınlawda kerek bolatuǵın ásbap-úskenelerdiń dizimi:

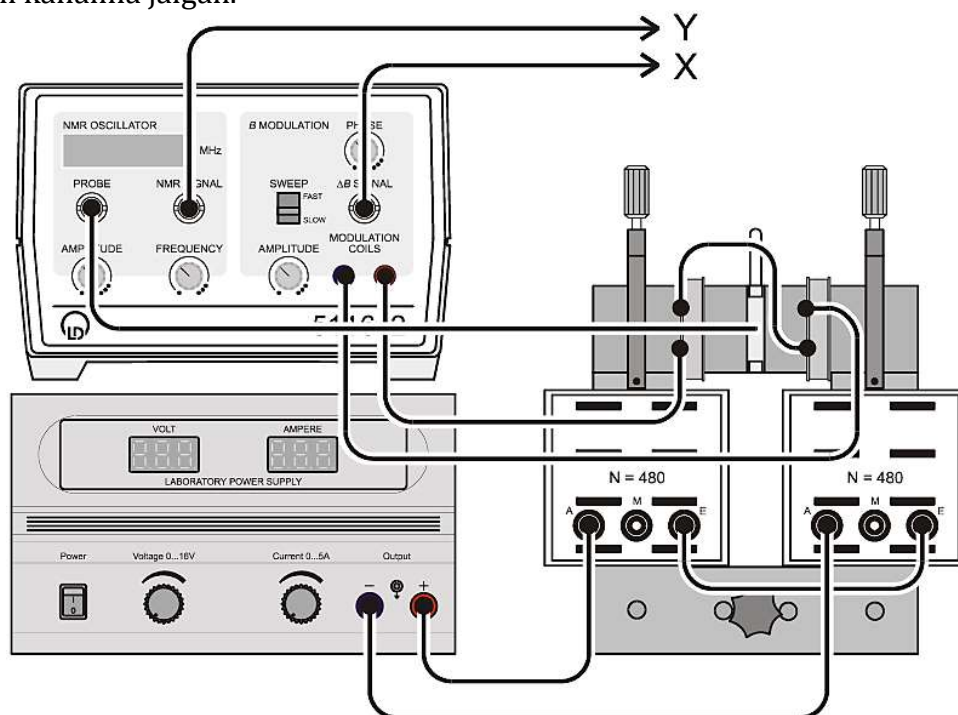
Ásbap-úskeneler atı	Sanı	Nomeri
YMR ólshew blogı	1 dana	514606
YMR tok deregi	1 dana	514602
U-tárizli ózek	1 dana	562 11
Katushka 10 A, 480 oramlıq	2 dana	562 131
Turaqlı tok deregi 0...16 V, 0...5 V	1 dana	521 545
Analoglı oscilloskop HM 303	1 dana	575211
Koaksiallıq kabeller, 1m	2 dana	501 02
Sensor CASSY USB	1 dana	524010 USB
CASSY Lab	1 dana	524 200
Ekranlanǵan koaksiallıq kabeller/4mm	2 dana	575 24
Qáwipsiz jalǵaw sımı, 50 sm qızıl	1 dana	500 621
Qáwipsiz jalǵaw sımı 100 sm qızıl	1 dana	500 641
Qáwipsiz jalǵaw sımı, 100 sm kók	1 dana	500 642
Qosımsha:		
Fizikanıń universallıq ólshewshi ásbabı	1 dana	531 835
Kombinirlik (комбинированный) B-Sensor	1 dana	5240381
Uzaytırwshı kabel, 15-polyuslı	1 dana	501 11

Dúzilisti jalǵaw tártibi:

- Eki katushkanı U-tárizli transformatordıń ózegine orналаstırıń.
- Modulyaciyalawshı katushkalardı polyuslıq nakonechnikler arasına bir tegiste kirgiziń hám yadrolıq magnitlik rezonans zondın (úlgini) U-tárizli ózekke bir tegis orналаstırıń.
- Eki katushkanı turaqlı derekke izbe-iz etip 11-súwrette kórsetilgendey qılıp orналаstırıń.
- Modulyaciyalawshı katushkalardı yadrolıq magnitlik rezonans dereginiń “MODULATION” shıǵıw kanalına izbe-iz etip jalǵań.

■ Yadroliq magnitlik rezonans úlgisin yadroliq magnitlik rezonans dereginiñ “*PROBE*” kiriw kanalına jalǵań.

■ “*NMR SIGNAL*” shıǵıw kanalın oscilloskoptıń vertikal kósherine sáykes keliwshi kanalına hám “*ΔB SIGNAL*” shıǵıw kabelin bolsa oscilloskoptıń gorizantal kósherine sáykes keliwshi kanalına jalǵań.



11-suwret. Yadroliq magnitlik rezonans qubılısı baqlanatuǵın eksperimentallıq dúzilistiń jalǵanıw sxeması.

8-§. Eksperimentallıq jumislardı orınlaw tártibi

a) Suyıqlıq hám qattı dene úlgilerinde protonlardıń yadroliq magnitlik rezonansın baqlaw.

- Oscilloskoptı *xy*-rejimine ornatań.
- Tez razvertkanı tanlań hám modulyaciyanıń amplitudasın úlken mániske qoyıń.
- Jiyilik mánisin maksimal mániske qoyıń.
- *HF* (high frequency) amplitudasın qızıl *LED* jańǵańǵa shekem hám 19 *MHz* dı kórsetkenge shekem áste arttırıń.
- Jiyilik mánisin shama menen 18,5 *MHz* ge shekem kemeytiriń.
- Glicerın úlgisiniń trubkasındaǵı rezina-sańlaǵın úlgi ólshew kamerasınıń orayında jaylasaman degenge shekem jılastırıń.
- Úlgi trubkasın ástelik penen ólshew kamerasına kirgiziń (eger úlgi trubkası múyesh astında úlken kúsh penen kirgizilse *HF* katushka zıyanlanadı).
- oscilloskop ekranında yadroliq magnitlik rezonans signali payda bolǵańǵa shekem 10 A li katushka arqalı ótip atırǵan toǵın áste arttırıń.
- *HF* ampiltudasın áste ózgartire turıp yadroliq magnitlik rezonans signalın optimallastırıń.
- Yadroliq magnitlik rezonans signalın oscilloskop ekranınıń orayına magnit maydandı payda etiwshi katushkanıń toǵın yamasa jiyilikti ózgartiriw arqalı jılastırıń hám modulyaciyalıq amplitudanı durıslań.
- Signal fazasın joqarı hám tómengi signal razvertkası sáykes kelgenge shekem jılastırıń.

Eger siz signaldı jazıp alıwdı qáleseńiz dúzilisti CASSY ge jalǵań.

■ Eksperimentti suw úlgisi, polistirol úlgisi hám politetraftoretlen úlgileri menen qayta orınlap kórin.

b) Suyıqlıq hám qattı dene úlgilerinde ftor yadrosınıń yadrolıq magnitlik rezonansın baqlaw.

■ Eksperimentti (a) bólimde kórsetilgen tártipte politetraftoretlen (PTFE) úlgisi ushın qayta orınladı.

■ Dástlep, oscilloskop ekranında gorizontallıq awısıwdıń bir birligine jiyilik birlikleriniń qanshası sáykes keliwin anıqlań (x -kósheriniń basqa kósherge salıstırǵandaǵı birliǵı). Buniń ushın yadrolıq magnitlik rezonans signalınıń maksimumın jiyilik knopkası menen shkalanıń bólim sızǵına qaray jılastırıń hám jiyilikti belgileń (x -kósheriniń koordinatasın belgileń). Keyin signaldı náwbettegi shkalanıń bólim sızǵına jılastırıń hám jiyilikti belgileń.

■ Rezonans sızǵınıń yarım maksimumındaǵı sızıq keńligin oscilloskop ekranı birliginde ólsheń.

c) Ximiyada qollanıwı (yadrolıq magnitlik rezonans spektroskopiyası).

Yadrolıq magnitlik rezonanstıń ximiyada qollanıwına kirisiw sıpatında qol kreminiń yadrolıq magnitlik rezonans signalın izertlewdi alıp qaraw múmkin. Qol kreminiń quramında kóp muǵdarda gilicerin hám onıń túrine baylanıslı hár qıylı muǵdarda suw bar.

Gilicerin molekulasındaǵı vodorod yadrosınıń spinleriniń signalların dáslep (a) bólimde keltirilgen tártipte gilicerin úlgisi menen yadrolıq magnitlik rezonans apparatın optimallastırıw arqalı anıqlaw hám keyin qol kreminiń signalı menen salıstırıw múmkin.

■ Shama menen 50 sm uzınlıqtaǵı saloma bólegin tayarlań hám onı shama menen 10 mm den 15 mm ge shekemgi qalınlıqtaǵı qol kremi menen toltırıń.

■ Salomanı jaqsılap tazalań, yaǵnıy salomanıń tómengi bóliminde qol kremi joqlıǵına isenim payda etiń, bul ólshew kamerasınıń pataslanbawı ushın zárúr.

■ Saloma ústindegi rezinalı saqıynanı sonday etip jılıtıń úlgi ólshew kamerasınıń ortasında jaylassın.

■ Keyin yadrolıq magnitlik rezonans dúzilisin gilicerin úlgisi ushın eksperimenttiń (a) bóliminde keltirip ótilgenlerge sáykes tárizde optimallastırıń.

■ Gilicerin úlgisin ólshew kamerasınan áste shıǵarıp alıń hám qol kremi úlgisi salınǵan salomanı abaylap áste kirgiziń.

■ Eger zárúr bolsa jiyilikti sazlań hám signaldı baqlań. Úlginiń muǵdarına baylanıslı halda da jiyilikti sazlaw kerek boladı.

d) Biologiyada qollanıwı (spektroskopiya).

Yadrolıq magnitlik rezonanstıń biologiyada qollanıwına kirisiw sıpatında alma yamasa ósimliktiń yadrolıq magnitlik rezonans signalın izertlewdi alıp qaraw múmkin. Alma, jasıl burısh sıyaqlı miyweler quramında kóp muǵdarda suw bar boladı. Gúl japıraqları da quramında kóp muǵdarda suw saqlaydı.

Suw molekulasındaǵı vodorod yadrosınıń spinleriniń signalların dáslep (a) bólimde keltirilgen tártipte suw úlgisi menen yadrolıq magnitlik rezonans apparatın optimallastırıw arqalı anıqlaw keyin bolsa alma hám ósimlik signalı menen salıstırıw múmkin.

■ Shama menen 50 mm uzınlıqtaǵı saloma bólegin tayarlań hám onı shama menen 10 mm den 15 mm ge shekemgi qalınlıqtaǵı alma miywesi menen toltırıń.

■ Salomanı jaqsılap tazalań, yaǵnıy tómengi bóliminde alma qaldıqları joqlıǵına isenim payda etiń. Bul ólshew kamerasınıń pataslanbawı ushın zárúr.

■ Saloma ústindegi rezinalı saqıynanı sonday etip jılastırıń úlgi ólshew kamerasınıń ortasında jaylassın.

■ Keyin yadroliq magnitlik rezonans dúzilisin suw úlgisi ushın eksperimenttiń (a) bóliminde keltirip ótilgenlerge sáykes tárizde optimallastırıń.

■ Suw úlgisin ólshew kamerasınan áste shıǵarıp alıń hám alma úlgisi salınǵan salomanı abaylap áste kirgiziń.

■ Eger zárúr bolsa jiyiliktı sazlań hám signaldı baqlań. Úlginiń muǵdarına baylanıslı halda da jiyiliktı sazlaw kerek boladı.

■ Tap usınday etip protonniń yadroliq magnitlik rezonans signalın ósimlikler pahalında da baqlaw mumkin. Ósimlik pahalı ortasha birdey diametrge iye bolıwı kerekligine itibar beriń.

e) g-faktorın anıqlaw (teslametr kerek boladı).

■ Yadroliq magnitlik rezonans dúzilisindegi jiyiliktı eksperimenttiń (a) bólimine muwapıq gilicerin úlgisi ushın 18 MHz ge sazlań hám sáykes jiyiliktı ólsheń.

■ Úlgini ólshew kamerasınan abaylap áste shıǵarıń hám ólshew kamerasındaǵı magnit maydandı tangenciallıq *B-PROBE* menen ólsheń.

■ Tangenciallıq *B – PROBE* ni 12-súwret ke muwapıq polyuslıq nakonechnikler ortasına jaylastırıń hám magnit maydanın ólsheń.



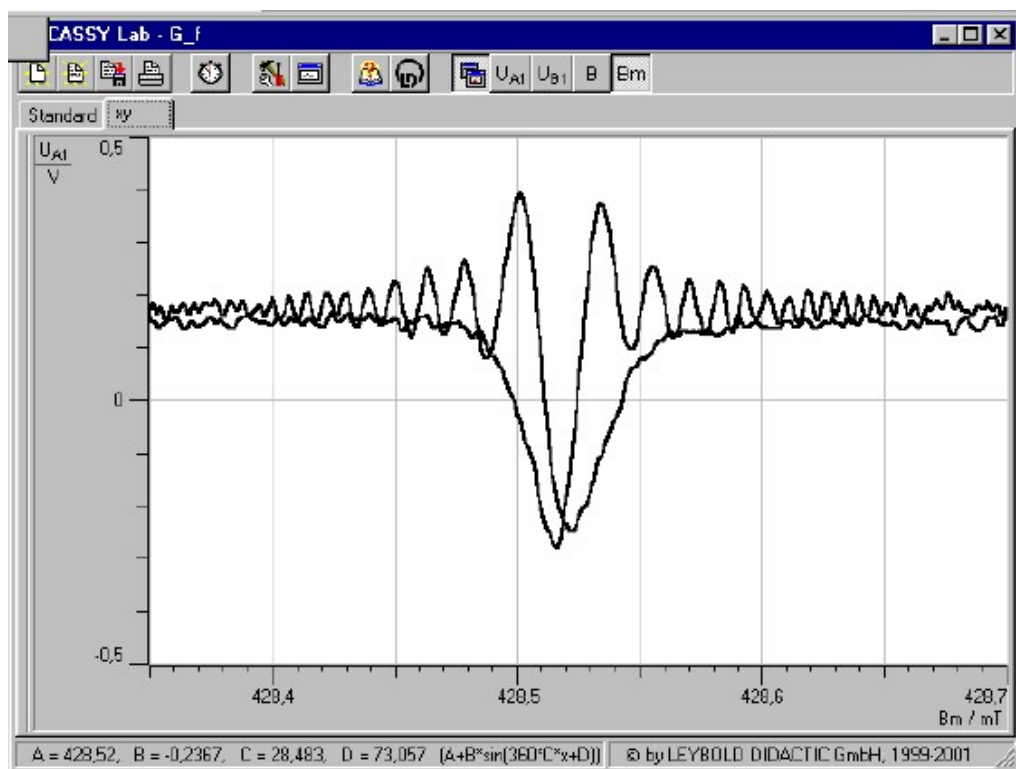
12-súwret. Tangenciallıq *B – PROBE* ni magnit polyusları ortasına jaylastırıwdıń sxemalıq kórinisi.

■ Yadroliq magnitlik rezonans dúzilisin suw úlgisi ushın tómenirek hám joqarıraq jiyiliklerde 10 A lik katushkadan aǵıp ótiwshi toqtı ózǵertiriw arqalı sazlań. Jiyilik hám magnit maydanın ólsheń.

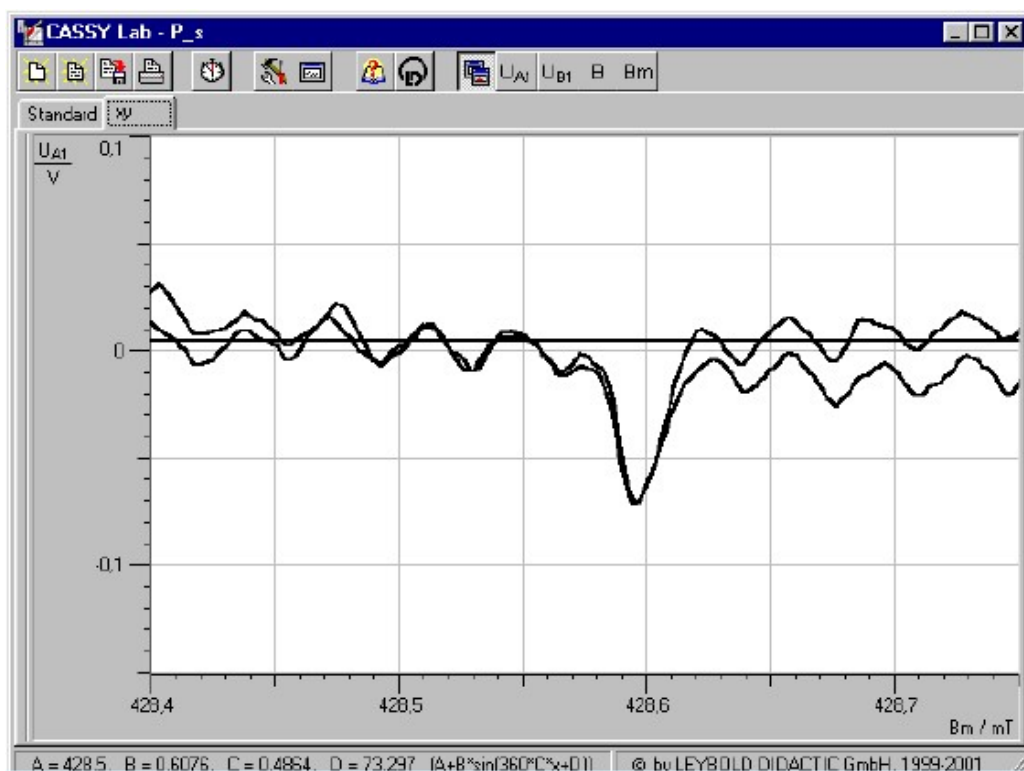
■ Eksperimentti politetraforetilen (PTFE) úlgisi ushın qayta orınláń.

9-§. Eksperimentlerde alınǵan nátiyjeler hám olardı tallaw

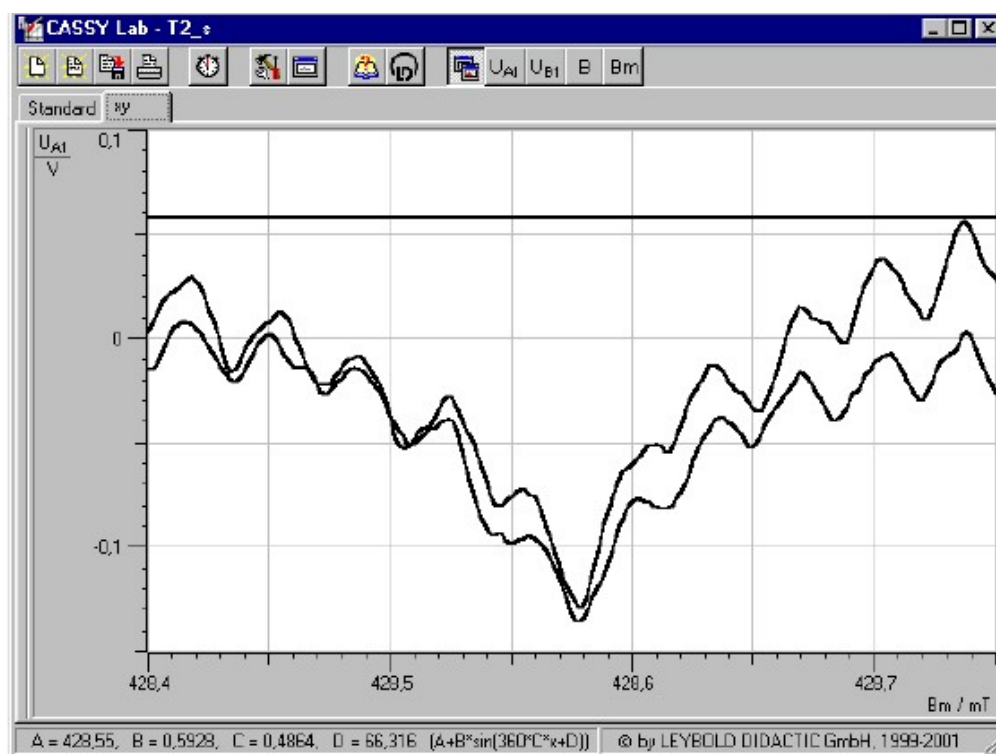
a) Protonlı suyıq hám qattı úlgilerde yadroliq magnitlik rezonans.



13-súwret. Glicerín ushın YMR jiyiligi $\nu = 18,25 \text{ MHz}$, $I = 3,6 \text{ A}$, XY-rejim



14-súwret. Polistirol ushın YMR jiyiligi $\nu = 18,25 \text{ MHz}$, $I = 3,6 \text{ A}$, XY-rejim



15-súwret. Politetraftoretillen ushın YMR jiyiligi $\nu = 17,17 \text{ MHz}$, $I = 3,6 \text{ A}$, XY-rejim

b) Qattı hám suyıq úlgilerdegi ftor yadrolarınıń yadrolıq magnitlik rezonansı.

Jiyilik birliklerinde oscilloskop birliǵı Δ :

$\Delta = \nu_1 - \nu_2 = 18.2921 \text{ MHz} - 18.2763 \text{ MHz} = 7.9 \text{ kHz}$ bolıp YMTK ushın jiyilik birliklerinde $\Delta\nu = 6 \text{ kHz}$ di beredi.

s) Ximiyada qollanılıwı (yadrolıq magnitlik rezonans spektroskopiyası).

Signaldıń forması hám halı shama menen gilicerin úlgisindegidey bolıp, ol 13-súwrette kórsetilgen. Intensivlik izertlenip atırǵan úlgidegi vodorod yadrolarınıń muǵdarına baylanıslı boladı.

d) Biologiyada qollanılıwı (spektroskopiya).

Signaldıń forması hám halı shama menen suw úlgisindegidey boladı. Intensivlik izertlenip atırǵan úlgidegi vodorod yadrolarınıń muǵdarına baylanıslı boladı.

e) g-faktornı anıqlaw (Teslametr kerek boladı).

1-keste. Gilicerin úlgisi ushın rezonans jiyiligi ν hám magnit maydanı B_0 . Magnit maydan indukciyasın ólshew kamerasındaǵı mánisine sáykes rawishte tuwrılalı.

$\frac{B_0}{\text{mT}}$	$\frac{\nu}{\text{MHz}}$
358	16.01
369	16.50
384	17.02
396	17.51
409	18.01
420	18.50
433	19.01
442	19.47

2-keste. Politetraftoretillen úlgisi ushın rezonans jiyiligi ν hám magnit maydanı B_0 . Magnit maydan indukciyasın ólshew kamerasındaǵı mánisine sáykes ráwishte tuwrılǵan.

$\frac{B_0}{\text{mT}}$	$\frac{\nu}{\text{MHz}}$
372	16.00
386	16.50
396	17.01
409	17.50
422	18.01
434	19.01
445	19.00
459	19.48

Alınǵan nátiyjelerdi bahalaw

a) Qattı dene hám suyıqlıq úlgilerinde protonlar menen yadrolıq magnitlik rezonans.

Eger úlgide vodorod yadroları bar bolsa yadrolıq magnitlik rezonans signalın baqlaw múmkin. Úlgi suyıq yamasa qattı (poroshok) halında bolıwı múmkin. Sonlıqtan, úlginin strukturasına baylanıslı vodorod yadrosı ushın baqlanǵan yadrolıq magnitlik rezonans sızıqlarının keńliginde sezilerlikdey parıq kózge taslanadı. Mısal ushın, glicerın úlgisi (suyıq) ushın alınǵan sızıqlar keńligi polistirol úlgisi (qattı) ushın alınǵan sızıqlar keńligine qaraǵanda kishirek boladı.

b) Qattı dene úlgilerinde ftor yadrosı menen yadrolıq magnitlik rezonans.

Ftordın rezonans sızıǵının yarım maksimumındaǵı sızıq keńligi ushın $\Delta\nu \approx 6 \text{ kHz}$ anıqlandı.

Sızıq keńligi tiykarınan tártibi 3 kHz ($80\mu\text{T}$) bolǵan bir tekli B_0 magnit maydanında anıqlandı.

s) Ximiyada qollanıluwı (yadrolıq magnitlik rezonans spektroskopiyası).

Glicerın hám qol kremi ushın yadrolıq magnitlik rezonans signalı derlik birdey rezonans jiyiliginde hám magnit maydanında baqlanıwı yadrolıq magnitlik rezonanstı ximiyalıq elementlerdi anıqlawda paydalanıw múmkin ekenligin kórsetedi. Keńeytirilgen (jetiliske)

yadroliq magnitlik rezonans spektroskopiyası molekulalardıń muǵdarın hám ximiyalıq quramın anıqlawda paydalanadı.

d) Biologiyada qollanıw (Spektroskopiya).

Alma úlgisiniń tazalıǵınan (kóp vodorod yadroları bar) kelip shıqqan halda kúshli intensivli signal baqlanıwı múmkin. Bul bolsa yadroliq magnitlik rezonans qubılısınan laboratoriyalıq sharayatlarda biologiyalıq úlgilerdi izertlew ushın da qollanıw múmkin ekenligin kórsetedi. Házirgi kúndegi zamanagóy yadroliq magnitlik rezonansqa tiykarlaǵan metodlardı ishki organlardıń súwretlemelerin alıw ushın rentgen hámde ultraseslik diagnostikalıq metodlarǵa qosımsha túrde paydalanıw keń engizilgen.

e) g-faktordı anıqlaw (Teslametr zárúr boladı).

Rezonans shártine muwapıq ((9) teńleme) glicerın hám politetraftoretılenniń (PTFE) g-faktori

$$g = \frac{h}{\mu_n} \frac{\nu}{B_0} \quad (11)$$

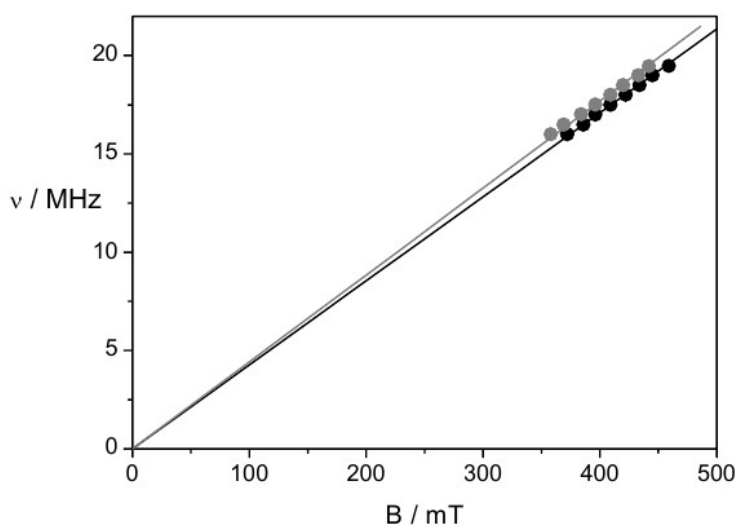
(bul jerde $h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, $\mu_n = 5.051 \cdot 10^{-27} \frac{\text{J}}{\text{T}}$) rezonans jiyliginiń magnit maydanı funkciyası sıpatındaǵı grafiginiń qıyalıǵın $\frac{\nu}{B_0}$ anıqlaw járdeminde bahalanıwı múmkin (16-súwret).

Vodorod ushın: $g_H = 5.8$

Ádebiyatlarda: $g_H = 5.5857$

Ftor ushın: $g_F = 5.6$

Ádebiyatlarda: $g_F = 5.2567$



16-súwret. g-faktordı anıqlaw ushın arnalǵan glicerın (kúlreń) hám PTFE (qara) rezonans jiyliginiń magnit maydanı B_0 ǵa ǵárezlilik funkciyasınıń grafigi.

Qosımsha maǵlıwmatlar

Yadroliq spin, máselen protonnıń yadroliq spini magnit maydanına salıstırǵanda múmkin bolǵan eki haldan biri boyınsha orientaciyalanıwı múmkin. Bir orientaciyanıń (energetikalıq haldıń) basqasına salıstırǵanda orientaciyalanıwshılıǵınıń shaması yadronıń magnit momentinen ($2\pi g\mu_n/h$ giromagnitlik qatnasqa proporcional) hám B_0 magnit maydanniń shamasınan ǵárezli boladı.

Ádette praktikada, magnit maydanına jaylastırılǵan úlgide jetkilikli dárejede kóp (Avagadro sanına jaqın) muǵdardaǵı yadrolar bar boladı. Yadroliq spinler sistemasınıń bunday halında, maydanniń qandayda bir joqarı jiylikli energiyaları qozdırılmaydı, yadrolar túrli energetikalıq hallar (sonıń menen yadroliq spinlerdiń orientaciyaları) boyınsha (8) Bolcman teńlemesine muwapıq bólistiriledi. Ojire temperaturalarında protonlardıń spinlik hallarınıń (yadroliq spinlerdiń orientaciyalarınıń) tómengi hám joqarǵı qáddileri arasındaǵı parıq $B_0 = 1 \text{ T}$ magnit maydanında 10^{-6} eV qa teń boladı. Azǵana artıqsha muǵdardaǵı

tómengi energetikalıq haldaǵı yadrolarsız yadrolıq magnitlik rezonans signalın baqlap bolmaydı.

Usı sebepke baylanıslı yadrolıq magnitlik rezonans spektroskopiyasınıń házirgi kúndegi versiyalarında B_0 maydanniń úlkenirek mánislerinen hám rezonans shártine (9 teńleme) muwapıq keliwshi úlkenirek jıyliklerden paydalanıladı. Bul bolsa úlginin hár qıylı yadrolarınıń saldarınan payda bolatuǵın yadrolıq magnitlik rezonans spektrindegı hár qıylı rezonans sızıqların ajratıw múmkinshiligin beredi. Bunnan tısqarı yadrolıq magnitlik rezonans signalları qısqa waqıtlıq impulslik metodlar hám yadrolıq magnitlik rezonanstıń arnawlı texnikaları járdeminde de ólshenedi. Yadrolıq magnitlik rezonans spektri *FFT* (*Fast – Fourier – Transformation*) járdeminde alınbaqta. Solay etip, yadrolıq magnitlik rezonans spektroskopiyası kóp tarawlarda molekulalardıń qurılısın anıqlaw hám úlgilerdin dúzilisin izertlewde áhmiyetli qurallardıń biri bolıp kelmekte. Medicinalıq maqsetlerde qollanılatuǵın 3D-YMR súwretlerin alıw ushın YMRdin impulslik metodlarına qosımsha ráwishte úlginin kesimlerindegi hár qıylı orınlarınan spinlerdin YMR signalların ajratıp alıw ushın maydan gradienti kerek boladı.

Pitkeriw qánigelik jumısı boyınsha ulıwmalıq juwmaqlar

1. Pitkeriw qánigelik jumısında yadrolıq magnitlik rezonanstıń fizikalıq tiykarları haqqında maǵlıwmatlar keltirip, onıń fizika, ximiya, biologiya hám medicinadaǵı áhmiyeti haqqında jetkilikli dárejede ayıldı.

2. Házirgi zaman oqıw laboratoriyasında ayırım zatlar ushın yadrolıq magnitlik rezonanstı baqlaw hám yadrolıq magnitlik rezonans qubılısına baylanıslı bolǵan ayırım matematikalıq ańlatpalardı (mısalı Blox teńlemelerin) kompyuterlerdiń járdeminde kórgizbeli túrde sanlı sheshiw múmkinshilikleri jaratılǵan. Usıǵan baylanıslı bul pitkeriw qánigelik jumısında sanlı modellestiriw máselelerine ayrıqsha dıqqat awdarılıp, bul boyınsha islengen jumıslar keltirildi.

3. Pitkeriw qánigelik jumıstıń eksperimentallıq bóliminde vodorodtıń (protonlar) hám ftordıń yadrolarınıń polistirol, glicerin hám teflon sıyaqlı zatlardaǵı yadrolıq magnitlik rezonanslıq signalları izertleniledi. Ftor yadrolarındaǵı rezonans sızıqlarınıń keńligin, proton hám ftor ushın g-faktorın anıqlaw máseleleri qaraldı. Bul máseleler eksperiment nátiyjeleri tiykarında tabıslı sheshilip, alınǵan nátiyjeler pitkeriw qánigelik jumısınıń eksperimentallıq bólimde keltirip ótildi.

4. Pitkeriw qánigelik jumısında keltirilgen teoriyalıq maǵlıwmatlar hám eksperimentallıq jumıs nátiyjelerin fizikanıń «Atomlıq fizika», «Atom yadrosı hám elementar bóleksheler fizikası» kursları jáne «Laboratoriyalıq praktikum»lar boyınsha oqıwlıq, oqıw-metodikalıq qollanbalar tayarlawda paydalanıw múmkin.

Paydalanılğan ádebiyatlardıń dizimi

1. Исаак Раби на сайте Nobelprize.org.
2. Purcell E.M.; Torrey H.C.; Pound R.V. Resonance Absorption by Nuclear Magnetic Moments in a Solid // Phys. Rev. — 1946. — Т. 69. — С. 37-38.
3. Bloch F.; Hansen W.W.; Packard M. Nuclear Induction // Phys. Rev. — 1946. — Т. 69. — С. 127.
4. Абрагам А. Ядерный магнетизм. — М.: Издательство иностр. лит., 1963.
5. Сликтер Ч. Основы теории магнитного резонанса. — М.: Мир, 1981.
6. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях: Пер. с англ. под ред. К. М. Салихова, М.: Мир, 1990.
7. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР: Пер. с англ. — М.: Мир, 1984. — 478 с.
8. Дероум А. Современные методы ЯМР для химических исследований.
9. Калабин Г.А. Количественная спектроскопия ЯМР природного органического сырья и продуктов его переработки. - М.: Химия, 2000. - 408 с..
10. Чижик В. И. Квантовая радиофизика. Магнитный резонанс и его приложения. — С-Петербург. ун-та, 2004 (2009), — 700с.
11. Аминова Р. М. Квантовохимические методы вычисления констант ядерного магнитного экранирования — в журн. Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. 2002. № 6. С. 11.
12. Габуда С. П., Плетнев Р. Н., Федотов М. А. Ядерный магнитный резонанс в неорганической химии. — М: Наука, 1988. — 214 с.
13. Габуда С. П., Ржавин А. Ф. Ядерный магнитный резонанс в кристаллогидратах и гидратированных белках. — Из-во: Наука. Новосибирск. 1978. — 160с.
14. Ионин Б.И., Ершов Б.А., Кольцов А.И., ЯМР-спектроскопия в органической химии: научное издание. – 2-е изд., Из-во: ЛГУ, Химия, Ленингр. отд-ние.– 1983. – 269 с.
15. Ершов Б.А., Спектроскопия ЯМР в органической химии. – Учебное пособие для вузов. – Из-во: СПбГУ – 1995. – 263с.
16. Robert M. Silverstein, Fancis X. Webster, David J. Kiemle - Spectrometric identification of organic compounds (seven edition).
17. http://lib.sinp.msu.ru/static/tutorials/46_17.pdf.
18. <http://www.uleth.ca/artsci/magnetic-resonance/bruker-avance-iii-hd-700>.
19. https://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_magnetic_resonance.
20. F. Bloch, Nuclear Induction, Physics Review 70, 460-473 (1946).
21. Torrey, H C (1956). "Bloch Equations with Diffusion Terms". Physical Review. **104** (3): 563–565.
22. https://en.wikipedia.org/wiki/Bloch_equations.
23. Р.Ричардс. Ядерный магнитный резонанс. Успехи физических наук. 1964. Том LXXXIII. Вып. 2. 299-360 с.
24. Abraham R.J., Mobli M. / Абрахам Р., Мобли М. Modelling 1H NMR Spectra of Organic Compounds / Моделирование 1H ЯМР-спектров органических соединений. Және: А.Абрагам. Ядерный магнетизм. Пер. с англ. Под ред. Г.В. Скроцкого. — М.: Изд. иностр. лит., 1963. — 551 с.
25. Хауссер К.Х., Кальбитцер Х.Р. ЯМР в медицине и биологии: структура молекул, томография, спектроскопия in-vivo.
26. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований.
27. Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley & Sons, 8th edition (2004). Chapter 13 is on Magnetic Resonance.