

## Kisterű NMR és alkalmazásai (Bányai István, jegyzet)

### Kisterű NMR

A kisterű NMR méréseket más néven relaxometriának, vagy NMR-relaxometriának is nevezik. Az angol nyelvterületen elterjedt a kifelbontású NMR elnevezés is. Ez utóbbi elnevezések arra utalnak, hogy a szokásos NMR spektrumok helyett relaxációs időt vagy relaxációs időket mérünk. Ide sorolják még a kis mágneses téren mért diffúziósebességet is.

Míg az elektronikában és a műszertechnikában a miniatürizálás volt a trend, addig az NMR-ben egyre erősebb, így nagyobb és drágább mágneseket vezettek be, hogy az érzékenységet és felbontást növelni tudják. Ez a lehetőség azonban egyre kevesebb kutatónak áll rendelkezésére, így alternatívaként a kisterű NMR készülékek is kezdenek elterjedni. Ennek az áron kívül még három oka van. Az olcsó kisterű NMR-ekkel nagy mintaszámú analitikai feladatok is megoldhatók, akár sok készülék folyamatos üzemeltetésével is. Olyan mérések is megoldhatók, amikor a készüléket mozgatni kell. A kisterű készülékek olyan helyeken is beállíthatók, amelyek zártak, veszélyes sugárzás, vagy fertőzés veszélye is fennáll. [Blümich, B. Casanova, F., Appelt, S. Chem. Phys. Letters 477 (2009) 231]

A kisterű NMR készülékek kétségtelen hátránya a kisebb érzékenység és a kisebb felbontás. Van még egy nehezen leküzdhető hátránya: nagyon nehéz homogén teret előállítani, ha viszont „shimmelhető”-re készítik, akkor lényegesen nagyobb méretű és költségesebb lesz. [Perlo, J. Casanova, F. Blümich, B. Science 315 (2007) 1110] Így természetesen nem alternatívája, hanem kiegészítője a nagyfelbontású NMR-nek. A jellegzetes területek, ahol alkalmazzák

- tömbfázisok relaxáció sebességének mérése
- paramágneses anyagok oldatai relaxivitásának meghatározása
- tömbfázisok NMR diffúziometriás mérése
- tömbfázisok spektroszkópiája
- a mágnesen kívüli mérések (NMR-mouse, NMR-profiler), az előző négy területen. [Perlo, J. Casanova, F. Blümich, B. J. Magn. Reson. 180 (2006) 274.]

A kisterű NMR mérések az előzőekben említett hátrányát nagymértékben kiküszöböli a magnetotechnikának, az elektronikának és a számítástechnikának a fejlődése. Ma már akár 40 MHz-es  $^1\text{H}$ -NMR rezonanciafrekvenciát elérő mágneses teret is képesek állandó mágnessel előállítani, ami lehetővé teszi kisterű és nagyfelbontású NMR felvételét a mágnesen belül, de ami még fontosabb a mágnesen kívül. A mágnes méretének csökkentését is el tudták érni, ma már „kévébab” nagyságú mágnesek is vannak, amelyekkel a standard 5 mm-es csőben is lehet mérni. [Blümich, B. Casanova, F., Appelt, S. Chem. Phys. Letters 477 (2009) 231]

Az elektronikai fejlesztések lehetővé tették a kisebb terjedelmű elektronikának és rádiótechnikának készítését. Azaz nem csak a mágnes, hanem „konzol” is szállítható. A számítástechnikai fejlesztése lehetővé tették a relaxometriás mérések gyors kiértékelését, a kemometria alkalmazását és az un relaxációs profilok megszerkesztését. [McDowell, A. Fukushima, E. Appl. Magn. Reson. 35 (2008) 185.] Az értelmezésüknek kialakítása, azaz a relaxáció és a fizikai állapot, illetve kémiai minőség kapcsolatának felderítése nagy lépést jelent a kisterű NMR jelenlegi alkalmazásaiban. Az utóbbi évtized tudományos közleményei ebbe az irányba mutatnak.

Néhány tipikus alkalmazása a következő:

- relaxivitás mérése, nedvességtartalom meghatározás céljából festmények és műtárgyak esetében [Blümich, B. Casanova, F., Appelt, S. Chem. Phys. Letters 477 (2009) 231]
- diffúzió mérés emulziók cseppméretének meghatározása céljából [Hathout, R. M., Woodman, T. J. J. Control. Release 161 (2012) 62 ]
- relaxáció mérés élelmiszerek vizsgálatában (Marccone, M.F., Wang, S., Albabish, W., Nie, S., Somnarain, D., Hill, A. Food Res. Intern. 51 (2013) 729
- oliva olajak eredetiségvizsgálatára (Vlahov, G. Progr. Nucl. Magnet. Reson. Spect. 35 (1999) 341)
- a bőr állapotának vizsgálatára a kozmetikai iparban illetve a bőrgyógyászatban [Blumich, B., Casanova, F. in: S. Stapf, S. Han (Eds.), NMR in Chemical Engineering, Wiley-VCH, Weinheim, 2006, p. 369.]

## Tanácsok a jegyzőkönyv készítéséhez

A jegyzőkönyvet elektronikusan kérem elküldeni a

[banyai.istvan@science.unideb.hu](mailto:banyai.istvan@science.unideb.hu)

e-mail címre

A formája:

Rövid bevezetés (NMR alapjai, relaxációk és fogalmuk)

A  $T_1$  relaxációs idő mérése (inverzió visszaépülés)

A  $T_2$  relaxációs idő mérése (CPMG)

Az MR alapelve a kontrasztanyagok szerepe

Kísérleti rész

A  $90^\circ$ -os impulzus és meghatározása

A Mn(II)-edta komplex sztöchiometriájának meghatározása relaxometrián

A mérési adatok táblázatos formája

A kapott eredmény grafikonja

Értékelés

Mit mért minek a függvényében? Jellemezze a változást és annak az okát.

Keressen a szakirodalomban hasonló méréseket és vesse össze az adatokat vele.

Vigyázzon a pontos hivatkozásra és plágiumra. Keressen érdekes alkalmazásokat a relaxometriára.

A jegyzőkönyv maximális hossza három oldal legyen.

Elérhető irodalom:

[http://www.reak.bme.hu/fileadmin/user\\_upload/felhasznalok/legrady/OF\\_labor/meresleirasok/NMR\\_labor.pdf](http://www.reak.bme.hu/fileadmin/user_upload/felhasznalok/legrady/OF_labor/meresleirasok/NMR_labor.pdf)

<http://elte.prompt.hu/sites/default/files/tananyagok/Kozetfizika/ch09s05.html>

[https://en.wikipedia.org/wiki/Relaxation\\_\(NMR\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Relaxation_(NMR))