

105-2 學年度儀器分析書面報告

姓名：劉冠伶 學號：4a440051 班級：化材二乙 日期 106/06/04

書面報告題目：**核磁共振光譜儀之儀器原理、構造、應用**

一、儀器原理

是利用原子核具有自旋角動量的特性，當原子核被施予外加磁場、而且方向與磁矩方向不同時，原子核原本的磁矩（可以想像為陀螺的軸心），會繞著磁場方向擺動旋轉，就像陀螺在旋轉過程中，會傾斜旋轉擺動一樣。這個現象，有一個專有名詞，叫做進動（precession），而進動具有能量，也有一定的頻率。而且在固定強度的外加磁場中，這個頻率也會固定不變。

由於原子核在進動的過程，其磁矩與外加磁場方向的夾角並不是連續的，而是由原子核的磁量子數決定，磁矩的方向，會在施予外加能量後，在這些磁量子數間，呈現跳躍式的變化，不是平滑地改變方向。這個外加能量，通常會施以外加的射頻場來提供。而這個現象，被稱為「共振」。而且，不是每一種原子核都會發生「共振」現象，那些質子數和中子數均為偶數的原子核，便不會發生共振，如，氧-16，氦-20。

二、儀器構造

核磁共振儀（NMR Spectrometer）是基於核磁共振光譜法所設計出的儀器，它主要結構包含兩個部分：

1.磁場: 電流、運動電荷、磁體或變化電場周圍空間裡存在的一種特殊形態的物質，其基本特性是對場中運動帶電粒子施加力，或對場中有磁矩的粒子及物體施加轉矩。因此，可根據這一點來描述磁場。描述磁場的基本物理量是磁感應強度 B ，它是個矢量，其大小和方向可根據運動電荷受到的力所遵從的洛倫茲力公式確定，也可根據磁矩 m 在磁場中受到力矩 M 的公式 $M=m \times B$ 確定。磁感應強度的單位是特斯拉(T)，另一個常用的單位是高斯(Gs 或 G)， $1Gs=10T$ 。

磁場是個無散度有旋度的矢量場，磁場可以用磁力線形像地圖示，磁場的磁力線

是一些無源的閉合曲線組成的曲線族。又分為

a. 恆定磁場（靜磁場）：恆定電流（直流）或靜止永磁體產生的磁場，大小和方向都不隨時間改變。

b. 交變電流或運動永磁體產生的磁場，大小和(或)方向隨時間改變，稱為交變磁場(磁場大小和方向都改變)或脈動磁場(磁場只有大小改變而方向不變)。

2. 放置在強力磁場中心的探棒 (Probe): 探棒內部除了線圈之外，還包含能從另一端置入樣本的樣本室。

現今使用的核磁共振儀有連續波（continual wave, CW）及脈衝傅立葉（PFT）變換兩種形式。

1. 連續波核磁共振儀主要由磁鐵、射頻發射器、檢測器、放大器及記錄儀等組成。磁鐵用來產生磁場，主要有三種：永久磁鐵，電磁鐵[磁感應強度可高達 24000 Gs (2.4 T)]，超導磁鐵[磁感應強度可高達 190000 Gs (19 T)]。

核磁共振波譜儀的解析度多用頻率表示（也稱「兆數」）其定義是在儀器磁場下激發氫原子所需的電磁波頻率。如一台磁場強度為 9.4T 的超導核磁中，氫原子的激發頻率為 400MHz，則該儀器為「400 兆」的儀器。頻率高的儀器，解析度好，靈敏度高，圖譜簡單易於分析。磁鐵上備有掃描線圈，用它來保證磁鐵產生的磁場均勻，並能在一個較窄的範圍內連續精確變化。射頻發射器用來產生固定頻率的電磁輻射波檢測器和放大器用來檢測和放大共振信號。記錄儀將共振信號繪製成共振圖譜。

2. PFT-NMR

脈衝變換傅立葉核磁共振波譜儀（pulse Fourier transform-NMR）與連續波儀器不同，它增設了脈衝程序控制器和數據採集處理系統，利用一個強而短（1~50 μ s）的脈衝將所有待測核同時激發，在脈衝終止時及時打開接收系統，採集自由感應衰減信號（FID），待被激發的核通過弛豫過程返回平衡態時再進行下一個脈衝的激發。得到的 FID 信號是時域函數，是若干頻率的信號的疊加，在計算機中經過傅立葉變換轉變為頻域函數才能被人們識別。PFT-NMR 在測試時常進行多次採樣，而後將所得的總 FID 信號進行傅立葉變換，以提高靈敏度和信噪比（進行 n 次累加，信噪比提高 $n^{0.5}$ 倍）。

PFT-NMR 靈敏度很高，可以用於低豐度核，測試時間短（掃一次一到幾秒），還可以測定核的弛豫時間，使得利用核磁共振測定反應動態成為現實

三、儀器應用

核磁共振最早用於無機、有機小分子之化學結構分析，之後被一些研究人員藉由檢驗組織中的水分來分析生物屍體。1959年，有人利用 NMR 測出大鼠體內之血液流速，證明 NMR 可用於研究活生生的動物而不傷害牠們，加上之後造影技術的發達，NMR 亦廣泛的應用於醫學上，即磁振造影（MRI，Magnetic Resonance Image）。

近年來，生物學家，尤其是生物化學研究者對 NMR 這項技術越來越感興趣，因為他們想要進一步了解分子的構造，通常必須靠繞射法（包括 X 光、中子繞射法或電子繞射法，以 X 光繞射法為主流）或是核磁共振光譜法才能進一步確定。

X 光繞射法和核磁共振光譜法，二者最大的不同處，在於 X 光繞射法必須先將蛋白質結成晶體後，才能進行結構上的分析，而以核磁共振光譜則可測得在溶液環境下分子的結構。因為我們知道蛋白質主要都是在溶液環境下發揮作用，且結構通常具有相當大的彈性，有時形成結晶後已與先前活化狀態的型態不同，由 X 光繞射法所得到的結構，並非都可正確的表現出蛋白質於活性狀態下的構形，因此用核磁共振光譜法對蛋白質結構的研究帶來很大的幫助。近年來蛋白質體學發展快速，主要是因為要了解基因功能，必須先了解蛋白質如何發生作用，而要能先了解蛋白質結構，才能知道蛋白質發生作用的部位及原因；另一方面，若能快速觀察了解蛋白質與藥物結合後的情形，據以設計藥物，可大幅縮短製藥時間，同時也可充分掌握藥物作用情形，避免產生副作用。國內為了提高蛋白質結構解析速度，大大提升相關之研究設備，例如：同步輻射中心興建兩條基因體醫學實驗專用光束線及增購良好之 NMR 等儀器，相信未來在研究蛋白質體學時會非常便利。

四、參考資料來源

<http://www.acttr.com/tw/tw-faq/tw-faq-nmr/84-tw-faq-what-is-nmr.html>

<http://www.acttr.com/tw/tw-faq/tw-faq-nmr/314-tw-faq-nmr-principle.html>

<https://read01.com/3BJ2Jk.html>

<http://web.svdcc.fju.edu.tw/~bio/excel/content05/html/50b.htm>