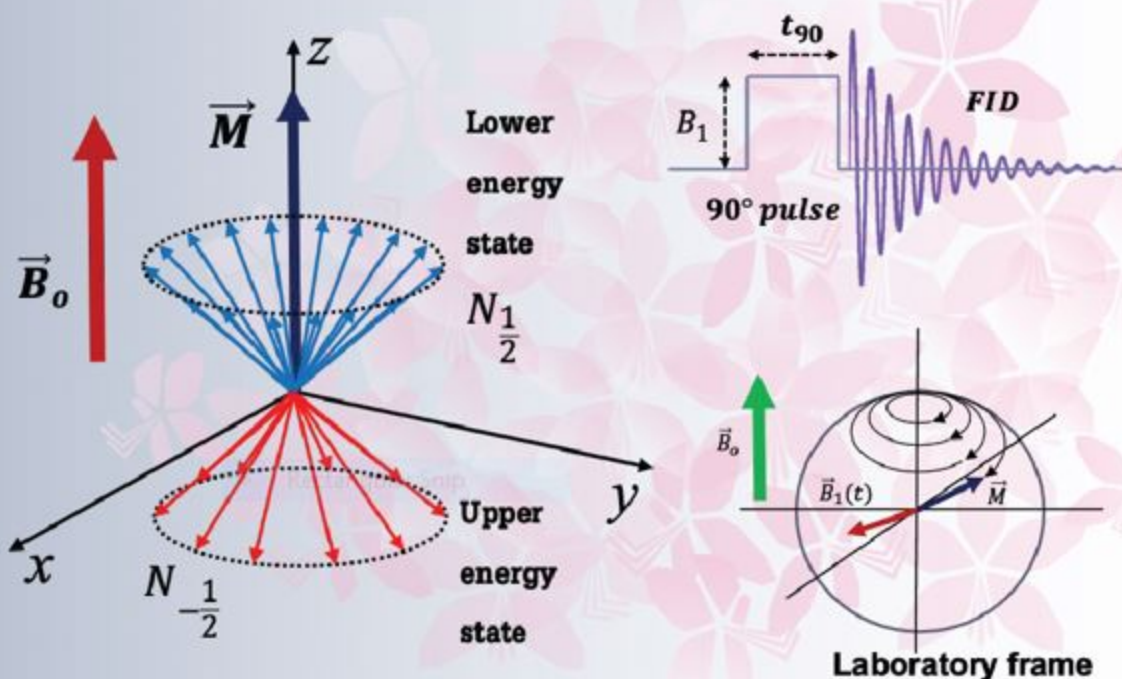




ทุนส่งเสริม
การผลิตตำรา

การกำหนด

แม่เหล็กลิวเคลียสเบื้องต้น



พื้นฐานทางฟิสิกส์และการประยุกต์ใช้งานด้านสเปกโทรสโกปีในโดเมนเวลา

ผศ. ดร.นาท เสาวดี

สาขาวิชาฟิสิกส์

คณะวิทยาศาสตร์

มหาวิทยาลัยขอนแก่น



การกำหนดแม่เหล็กนิวเคลียสเบื้องต้น

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.นาท เสาวดี
คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น

ได้รับทุนสนับสนุนการผลิตตำรา มหาวิทยาลัยขอนแก่น

ลำดับที่ 213

โดยมหาวิทยาลัยขอนแก่น พ.ศ.2566

ISBN (e-book) 978-616-438-824-6

นาท เสาวดี.

การกำหนดแม่เหล็กนิวเคลียสเบื้องต้น / นาท เสาวดี. -- พิมพ์ครั้งที่ 1. -- ขอนแก่น : คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น, 2566.

155 หน้า : ภาพประกอบ

1. นิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์. 2. แมกเนติกเรโซแนนซ์. 3. แม่เหล็ก. (1) มหาวิทยาลัยขอนแก่น. คณะวิทยาศาสตร์. (2) ชื่อเรื่อง.

QC762 น465 2566

ISBN (e-book) 978-616-438-824-6

จัดทำโดย ศูนย์นวัตกรรมการเรียนการสอน มหาวิทยาลัยขอนแก่น

ราคา 180 บาท

สงวนลิขสิทธิ์ โดยมหาวิทยาลัยขอนแก่น ตั้งแต่ปี พ.ศ. 2566



คำนำ

ตำราเล่มนี้เรียบเรียงขึ้นมาเพื่อใช้สำหรับประกอบการเรียนการสอนในรายวิชา SC513219 การกำหนดแม่เหล็กนิวเคลียสเบื้องต้น (introduction to nuclear magnetic resonance, NMR) ของคณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น ซึ่งเป็นวิชาเลือกสำหรับนักศึกษาสาขาวิชา ฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น ชั้นปีที่ 3 และ ชั้นปีที่ 4 เนื้อหาในตำราเล่มนี้จะ เน้นสร้างความเข้าใจพื้นฐานด้านฟิสิกส์ของการกำหนดแม่เหล็กนิวเคลียส รวมไปถึงการ ประยุกต์ใช้งานด้านการวิเคราะห์สเปกตรัมบางส่วนโดยเนื้อหาประกอบด้วย 8 บทดังนี้ บทที่ 1 บทนำ บทที่ 2 สมบัติทางแม่เหล็กของนิวเคลียส บทที่ 3 ฟิสิกส์ของ NMR บทที่ 4 การวัดค่าเวลา การผ่อนคลาย บทที่ 5 ส่วนประกอบของเครื่อง NMR บทที่ 6 กลไกการผ่อนคลายทาง NMR บท ที่ 7 การประยุกต์ใช้การผ่อนคลาย NMR และ บทที่ 8 เคมีคัลชิฟต์ (chemical shift) โดยบทที่ 2-4 เป็นเนื้อหาทางฟิสิกส์ที่เข้มข้น เพื่อสร้างความเข้าใจพื้นฐานของ NMR บทที่ 5 จะอธิบายถึง การทำงานของส่วนประกอบต่างๆ ของเครื่อง NMR อย่างคร่าวๆ ในบทที่ 6 จะอธิบายถึงทฤษฎี ความเชื่อมโยงระหว่างสิ่งที่วัดได้จากสัญญาณ NMR และสมบัติทางฟิสิกส์ของสารตัวอย่าง ในบท ที่ 7 จะเป็นการประยุกต์ใช้งาน NMR ในโดเมนของเวลา และในบทสุดท้ายบทที่ 8 จะอธิบายถึง พื้นฐานการวิเคราะห์ข้อมูลในโดเมนของความถี่อย่างคร่าวๆ นอกจากใช้ประกอบการเรียนการ สอนแล้วผู้เขียนหวังว่าตำรานี้จะเป็นประโยชน์กับบุคคลทั่วไปที่สนใจอยากเรียนรู้พื้นฐานทาง ฟิสิกส์ของ NMR

นาท เสาวดี
มีนาคม 2566



กิตติกรรมประกาศ

ข้าพเจ้าขอขอบคุณบิดามารดาและครอบครัวของข้าพเจ้าที่คอยดูแลข้าพเจ้ามาจนเติบโตใหญ่ และเป็นกำลังใจให้เสมอมาเมื่อข้าพเจ้าพบอุปสรรคต่างๆ ในชีวิต ครอบครัวเป็นผู้อยู่เบื้องหลังความสำเร็จทุกอย่างเสมอมา ข้าพเจ้าขออุทิศคุณความดีบุญกุศลที่จะเกิดจากตำราเล่มนี้ให้บิดามารดาและสมาชิกในครอบครัวของข้าพเจ้าทุกคน ข้าพเจ้าขอบูชาพระคุณของครูบาอาจารย์ของข้าพเจ้าทุกท่านตั้งแต่ระดับอนุบาลจนจบปริญญาเอกที่ได้อบรมสั่งสอนข้าพเจ้าจนมีวิชาความรู้จนได้เข้ามาทำงานที่มหาวิทยาลัยขอนแก่นและได้มีโอกาสได้ถ่ายทอดความรู้แก่นักเรียนนักศึกษาจนถึงทุกวันนี้ ข้าพเจ้าขอขอบคุณเพื่อนร่วมงานทุกท่านที่ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยขอนแก่น ซึ่งให้คำปรึกษาให้กำลังใจและให้ความช่วยเหลือในหลายๆ โอกาสที่ผ่านมาจนทำให้ภารกิจหน้าที่การงานต่างๆ ผ่านลุล่วงไปได้ด้วยดี

นาท เสาวดี

มีนาคม 2566



สารบัญ

คำนำ.....	i
กิตติกรรมประกาศ	ii
บทที่ 1. บทนำ (Introduction).....	1
1.1. ความเป็นมา (History).....	1
1.2. การประยุกต์ใช้ (Applications).....	3
1.2.1. NMR แบบการแปลงฟูริเยร์ (Fourier transform NMR).....	4
1.2.2. NMR ในโดเมนเวลา (Time domain NMR or TD-NMR).....	6
1.3. คำถามท้ายบทที่ 1	8
บทที่ 2. สมบัติทางแม่เหล็กของนิวเคลียส (Magnetic Properties of the Nucleus)9	
2.1. โมเมนตัมเชิงมุมของออร์บิทัลและสปิน (Orbital and Spin Angular Momentums)	9
2.2. โมเมนต์แม่เหล็ก (Magnetic Moment).....	11
2.3. อันตรกิริยาของนิวเคลียสกับสนามแม่เหล็กภายนอก (Nuclear Interaction with An External Magnetic Field).....	15
2.4. นิวเคลียสแมกเนไทเซชัน (Nuclear Magnetization).....	20
2.5. คำถามท้ายบทที่ 2	26
บทที่ 3. ฟิสิกส์ของ NMR (NMR Physics)	27
3.1. พัลส์ความถี่วิทยุ (Radio Frequency Pulse).....	27
3.2. การกระตุ้นด้วยความถี่วิทยุ (Radio Frequency Excitation)	31
3.3. สัญญาณการเหนี่ยวนำอิสระ (Free Induction Signal).....	35
3.4. สมการการเคลื่อนที่ในกรอบอ้างอิงหมุน (Equation of Motion in the Rotating Frame).....	37
3.5. การผ่อนคลาย NMR (NMR Relaxations).....	40

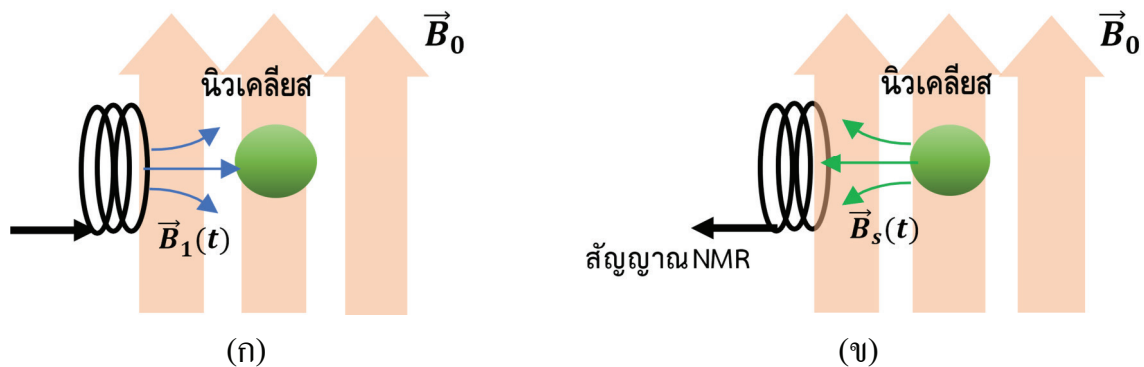
3.6. สมการบล็อค (The Bloch Equations)	43
3.7. คำถามท้ายบทที่ 3	46
บทที่ 4. การวัดค่าคงที่เวลาการผ่อนคลาย (Measurement Of Relaxation Times)47	
4.1. การสลายเหนี่ยวนำอิสระ (Free Induction Decay).....	47
4.2. การวัดค่าเวลาการผ่อนคลาย T_1 (Measurement of T_1 Relaxation Time)	49
4.3. การก้องสปินของฮานน์ (The Hann Spin-Echo)	52
4.4. เทคนิคคาร์-เพอร์เซลล์ (The Carr-Purcell Technique)	56
4.5. เทคนิคคาร์-เพอร์เซลล์-ไมบูม-กิลล์ (The Carr-Purcell-Meiboom-Gill Technique)	58
4.6. คำถามท้ายบทที่ 4	61
บทที่ 5. ส่วนประกอบของเครื่อง NMR (NMR Instruments)	62
5.1. ภาพรวม (Overview).....	62
5.2. แม่เหล็กหลัก (Main Magnet).....	64
5.2.1. แม่เหล็กไฟฟ้าความต้านทาน (Resistive magnets).....	65
5.2.2. แม่เหล็กสารตัวนำยิ่งยวด (Superconducting magnets)	66
5.2.3. แม่เหล็กถาวร (Permanent magnets).....	68
5.3. การเพิ่มความสม่ำเสมอสนามแม่เหล็ก (Magnetic Shimming).....	70
5.4. สนามแม่เหล็กเกรเดียนต์ (Magnetic Field Gradients)	72
5.4.1. ขดลวดคู่แมกซ์เวลล์ (Maxwell's pair coils)	73
5.4.2. ชุดขดลวดกอลเลย์ (Golay set coils).....	74
5.5. ขดลวดความถี่วิทยุ (Radio Frequency Coil).....	76
5.6. สวิตช์ T/R (T/R Switch)	80
5.7. การป้องกันสนามรบกวน (Shielding)	83
5.8. คำถามท้ายบทที่ 5	85

บทที่ 6. กลไกการผ่อนคลายทาง NMR (NMR Relaxation Mechanism).....	86
6.1. NMR ของของแข็ง ของเหลว และแก๊ส (NMR Of Solid Liquid and Gas).....	86
6.1.1. ของแข็ง (Solid).....	86
6.1.2. ของเหลว (Liquid).....	87
6.1.3. แก๊ส (Gas).....	87
6.2. สนามแม่เหล็กกระเพื่อม (Fluctuating Magnetic Field).....	88
6.3. ทอร์กของสนามแม่เหล็กกระเพื่อม (Torque of the Fluctuating Magnetic Field)	90
6.4. การกระจายความถี่ของการเคลื่อนที่โมเลกุล (Frequency Distribution of Molecular Motions).....	92
6.5. อันตรกิริยาแม่เหล็กของนิวเคลียสสปิน (Nuclear Spin Magnetic Interactions)97	
6.5.1. อันตรกิริยาแม่เหล็กขั้วคู่-ขั้วคู่ (Magnetic dipole – dipole interaction)97	
6.5.2. อันตรกิริยาไฟฟ้าสี่ขั้ว (Electric quadrupole interaction).....	98
6.5.3. อันตรกิริยาเคมีคัลชิฟต์แอนไอโซทรอปี (Chemical shift anisotropy interaction)	99
6.5.4. อันตรกิริยาคู่ควบแบบสเกลาร์ (Scalar coupling interaction).....	100
6.5.5. อันตรกิริยาจากการหมุน (Spin rotation interaction).....	101
6.6. คำถามท้ายบทที่ 6	102
บทที่ 7. การประยุกต์ใช้งานการผ่อนคลาย NMR (Applications of NMR Relaxation)	103
7.1. ความสัมพันธ์ของการผ่อนคลาย NMR และสมบัติทางกายภาพ (NMR Relaxation and Physical Properties Relation).....	103
7.2. การผ่อนคลายทาง NMR ที่ขึ้นอยู่กับลักษณะเนื้อสาร (Texture Dependent of NMR Relaxation)	105
7.3. การผ่อนคลายพหุคูณ (Multiple Relaxations).....	109
7.4. การวัดการไหลและการแพร่ (Flow And Diffusion Measurements)	116
7.4.1. การวัดการไหล (Flow measurement).....	116

7.4.2. ผลของสนามแม่เหล็กเกรเดียนต์ (Effect of the magnetic gradient fields)	118
7.4.3. การก้องเกรเดียนต์ (Gradient echo)	120
7.4.4. การวัดการแพร่ (Diffusion measurement)	125
7.5. คำถามท้ายบทที่ 7	126
บทที่ 8. พื้นฐานของเคมีคัลชิฟต์ (Basic of Chemical Shift)	128
8.1. การค้นพบเคมีคัลชิฟต์ (Discovery of Chemical Shift)	128
8.2. เคมีคัลชิฟต์ (The Chemical Shift)	129
8.3. การคู่ควบสปิน-สปินทางอ้อม (Indirect Spin-Spin Coupling)	134
8.4. คำถามท้ายบทที่ 8	138
บรรณานุกรม	139
ดัชนี	143
ประวัติผู้เขียน	151

บทที่ 1. บทนำ (Introduction)

1.1. ความเป็นมา (History)



รูปที่ 1.1 (ก) การกระตุ้นนิวเคลียสที่อยู่ในสนามแม่เหล็กคงที่ $\vec{B}_0$ (ข) การวัดสัญญาณ NMR จากนิวเคลียสหลังจากถูกกระตุ้น

การกำหนดแม่เหล็กของนิวเคลียส (Nuclear Magnetic Resonance หรือ NMR) คือปรากฏการณ์ดูดซับพลังงาน (energy absorption) และคายพลังงาน (energy emission) ของนิวเคลียสในรูปของอันตรกิริยาแม่เหล็ก (magnetic interaction) เมื่อนิวเคลียสนั้นอยู่ในสนามแม่เหล็กคงที่ ($\vec{B}_0$) อันหนึ่ง สนามแม่เหล็ก $\vec{B}_0$ นี้เรียกว่า **สนามแม่เหล็กหลัก** (main magnetic field) การวัดสัญญาณ NMR ประกอบด้วย 2 ขั้นตอน คือ 1) การกระตุ้นนิวเคลียส และ 2) การวัดสัญญาณ NMR ในขณะที่นิวเคลียสคายพลังงานเพื่อกลับสู่สถานะสมดุล จากรูปที่ 1.1 (ก) เมื่อให้กระแสไฟฟ้าที่เปลี่ยนกับเวลาด้วยความถี่ค่าหนึ่งกับขดลวดจะทำให้เกิดสนามแม่เหล็กที่เปลี่ยนกับเวลา ($\vec{B}_1(t)$) ถ้าความถี่ของสนามแม่เหล็ก $\vec{B}_1(t)$ นี้เท่ากับหรือใกล้เคียงกับความถี่ที่นิวเคลียสสามารถดูดซับได้ นิวเคลียสนี้จะถูกกระตุ้น (excite) ด้วยสนามแม่เหล็ก $\vec{B}_1(t)$ ให้อยู่ในสถานะพลังงานสูงขึ้น ในรูปที่ 1.1(ข) หลังจากการกระตุ้นนิวเคลียสจะปลดปล่อยพลังงานออกมาเพื่อกลับสู่สมดุล พลังงานที่ปล่อยออกมาจะอยู่ในรูปของสนามแม่เหล็กที่เปลี่ยนกับเวลา ($\vec{B}_s(t)$) ด้วยความถี่ธรรมชาติของนิวเคลียสนั้น ความถี่ธรรมชาตินี้เรียกว่า **ความถี่กำทอน** หรือ **ความถี่**

สั้นพ้อง (resonant frequency) หรือ ความถี่ลามอร์ (Larmor frequency, ω_L) เพื่อเป็นเกียรติแด่นักวิทยาศาสตร์ชาวไอริช โจเซฟ ลาร์มอร์ (Joseph Larmor) (รูปที่ 1.2(ก)) ผู้คิดค้นทฤษฎีการกำหนดแม่เหล็กของอนุภาค (Larmor, 1897) ซึ่งต่อมาถูกนำมาใช้ในการอธิบายปรากฏการณ์ NMR ได้เป็นอย่างดี



(ก)



(ข)



(ค)



(ง)

รูปที่ 1.2 (ก) โจเซฟ ลาร์มอร์ ผู้คิดค้นทฤษฎีการกำหนดแม่เหล็กของอนุภาค (ข) อิชิดอร์ ไอแซก ราบี ผู้ค้นพบปรากฏการณ์ NMR ในลำโมเลกุล (ค) เฟลิกซ์ บล็อก และ (ง) เอ็ดเวิร์ด มิลส์ เพอร์เซลล์ ผู้ค้นพบปรากฏการณ์ NMR ในของเหลวและของแข็ง

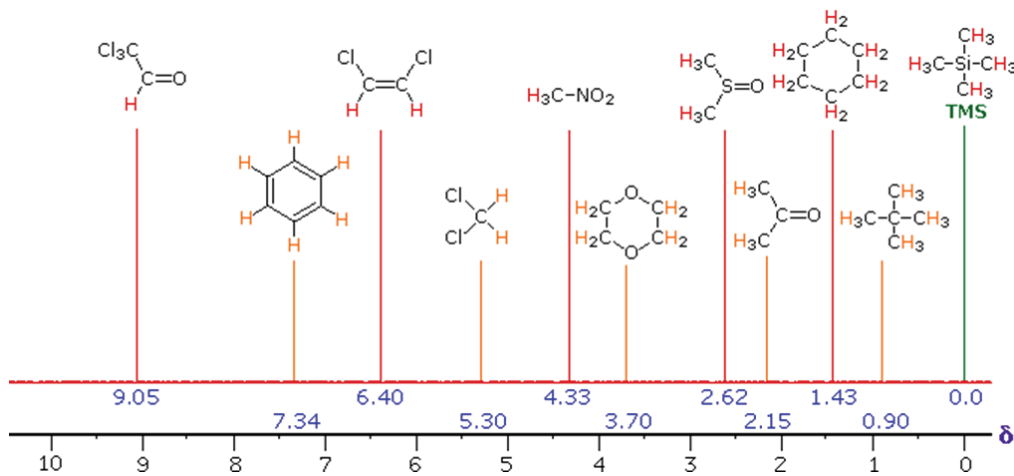
ลามอร์ไม่ใช่ผู้ค้นพบปรากฏการณ์ NMR แต่ปรากฏการณ์ NMR ถูกค้นพบภายหลังโดยนักวิทยาศาสตร์ชาวอเมริกันเชื้อสายโปรแลนด์ชื่อ อิชิดอร์ ไอแซก ราบี (Isidor Isaac Rabi) (รูปที่ 1.2(ข)) เขาค้นพบปรากฏการณ์ NMR ในลำโมเลกุล (molecular beam) ของไฮโดรเจน ดิวทีเรียม และ ลิเทียม (Rabi, 1938) และได้รับรางวัลโนเบลสาขาฟิสิกส์ (Nobel Prize in Physics) ในปี ค.ศ. 1944 การค้นพบของราบินั้นยังไม่สามารถนำมาใช้ประโยชน์ได้เนื่องจากลำอนุภาคต้องสร้างและทดลองในสุญญากาศ จนกระทั่งการค้นพบปรากฏการณ์ NMR ในของเหลวและของแข็งโดย เฟลิกซ์ บล็อก (Felix Bloch) (รูปที่ 1.2(ค)) (Bloch, 1946) และ เอ็ดเวิร์ด มิลส์ เพอร์เซลล์ (Edward Mills Purcell) (รูปที่ 1.2(ง)) (Purcell, 1946) จึงเป็นการเปิดประตูเพื่อนำปรากฏการณ์ NMR มาใช้ประโยชน์ได้อย่างมากมายในปัจจุบัน ทั้งสองคนทำการวิจัยอยู่คนละที่และไม่เกี่ยวข้องกันโดยที่ บล็อก ทำวิจัยอยู่ที่ Stanford ส่วน เพอร์เซลล์ ทำการวิจัยอยู่ที่ Massachusetts Institute of Technology ทั้งคู่ได้รับรางวัลโนเบลสาขาฟิสิกส์ร่วมกันในปี ค.ศ. 1952 ทั้ง บล็อก และ เพอร์เซลล์ ค้นพบปรากฏการณ์ NMR ของโปรตอน (นิวเคลียสของ

ไฮโดรเจน) โดย บล็อก พบปรากฏการณ์ NMR ในน้ำที่สนามแม่เหล็ก 0.18 T (ความถี่ 8 MHz) ส่วน เพอร์เซลล์ พบในพาราฟฟิน (paraffin) ที่สนามแม่เหล็ก 0.7 T (ความถี่ 30 MHz) การอธิบายปรากฏการณ์ NMR ของทั้งคู่ก็ต่างกัน บล็อก อธิบายปรากฏการณ์ NMR โดยใช้ทฤษฎีแม่เหล็กไฟฟ้าแบบดั้งเดิม (classical electrodynamics) ในรูปของการหมุนควงของโมเมนต์แม่เหล็ก (magnetic moment) ของนิวเคลียสและทอร์ก (torque) ของสนามแม่เหล็กภายนอกที่เกิดกับโมเมนต์แม่เหล็ก ส่วน เพอร์เซลล์ อธิบายโดยใช้ทฤษฎีควอนตัมของการดูดซับและคายพลังงานของระบบสปิน (spin system) ของนิวเคลียส การอธิบายทั้งสองแบบช่วยเสริมกันทำให้ภาพของปรากฏการณ์ NMR นั้นชัดเจนมากขึ้นและมีประโยชน์อย่างมากในการพัฒนาเทคโนโลยี NMR ในปัจจุบัน

1.2. การประยุกต์ใช้ (Applications)

ปัจจุบัน NMR มีการประยุกต์ใช้งานอย่างมากในด้านการแพทย์ (medicine) และเคมีวิเคราะห์ (chemical analysis) เทคโนโลยีที่มี NMR เป็นพื้นฐานอาจจะแบ่งได้เป็น 2 ประเภทหลักๆ คือ 1) การวิเคราะห์สเปกตรัม NMR (Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy หรือ NMRS) และ 2) การถ่ายภาพการกำทอนแม่เหล็ก (Magnetic Resonance Imaging หรือ MRI) นอกจากการประยุกต์ใช้งานทั้งสองประเภทนี้ยังมีการประยุกต์ใช้งานอย่างอื่นอีกหลายด้าน (Rinck, 2017) โดยในตำราเล่มนี้จะกล่าวถึงเฉพาะการประยุกต์ใช้งานการวิเคราะห์สเปกตรัม NMR ซึ่งสามารถแบ่งย่อยได้อีกเป็น 2 ประเภทได้แก่ 1) NMRS แบบการแปลงฟูริเยร์ (Fourier Transform NMR, FT-NMR) หรือเคมีคัลชิฟต์ (chemical shift) และ 2) NMRS ในโดเมนเวลา (Time Domain NMR, TD-NMR) หรือ NMR การผ่อนคลาย (NMR relaxation) ดังรายละเอียดพอสังเขปต่อไปนี้

1.2.1. NMR แบบการแปลงฟูริเยร์ (Fourier transform NMR)



รูปที่ 1.3 ตัวอย่างสเปกตรัมเคมีคัลซิฟต์ของโมเลกุลไฮโดรคาร์บอน (ดัดแปลงจาก Reusch, 2013)

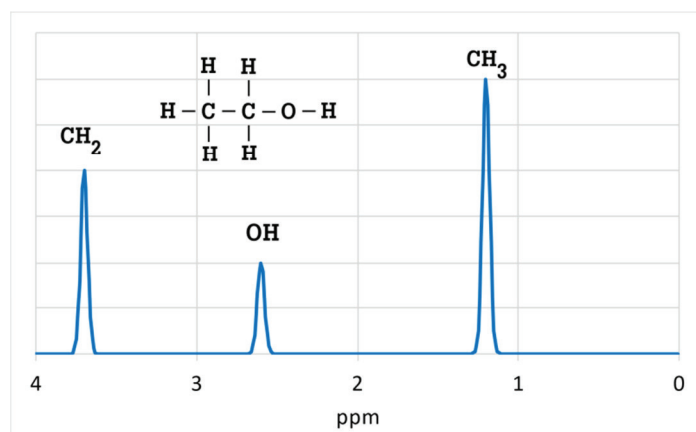
เคมีคัลซิฟต์ คือ การเลื่อนของความถี่กำหนดของนิวเคลียสเมื่อนิวเคลียสนั้นอยู่ในโมเลกุลต่างชนิดกันและ/หรือในโมเลกุลเดียวกันแต่ต่างตำแหน่งกัน โดยนิวเคลียสเหล่านี้จะมีความถี่กำหนดที่ต่างกันเล็กน้อย โดยทั่วไปเมื่อกล่าวถึง การวิเคราะห์สเปกตรัม NMR จะหมายถึงเคมีคัลซิฟต์นี้เอง สเปกตรัมเคมีคัลซิฟต์นั้นได้มาจากการแปลงฟูริเยร์ของสัญญาณ NMR (แปลงจากโดเมนเวลาเป็นโดเมนความถี่) เคมีคัลซิฟต์ใช้สัญลักษณ์เป็น δ มีหน่วยเป็น **part per million (ppm)** (รายละเอียดในบทที่ 8) เคมีคัลซิฟต์เป็นเครื่องมือที่ทรงพลังในการวิเคราะห์โครงสร้างโมเลกุลขนาดใหญ่และซับซ้อนของสารอินทรีย์ (organic substance) โดยเฉพาะโมเลกุลประเภทไฮโดรคาร์บอนดังตัวอย่างแสดงในรูปที่ 1.3 นิวเคลียสหลักที่ถูกใช้ในการวิเคราะห์เคมีคัลซิฟต์คือนิวเคลียสของไฮโดรเจน (^1H) หรือโปรตอนซึ่งพบมากที่สุด ในธรรมชาติในโมเลกุลไฮโดรคาร์บอน นิวเคลียสอื่นที่พบว่าการถูกใช้ในการวิเคราะห์เคมีคัลซิฟต์ได้แก่ คาร์บอน-13 (^{13}C) ฟลูออไรด์-15 (^{15}F) และ ฟอสฟอรัส-19 (^{19}P) เป็นต้น การเลื่อนของความถี่กำหนดในสเปกตรัมเคมีคัลซิฟต์นั้นน้อยมาก การที่จะแยกความถี่เหล่านี้ออกจากกันเพื่อให้ได้สเปกตรัมดังตัวอย่างในรูปที่ 1.3 นั้นจะต้องใช้สนามแม่เหล็กที่มีความเข้มสูงมากและมีความสม่ำเสมอ (homogeneity) สูงมาก โดยทั่วไปสนามแม่เหล็กที่ใช้ในการวัดสเปกตรัมเคมีคัลซิฟต์จะมีความเข้มสนามแม่เหล็กตั้งแต่ 5 – 40T ซึ่งเกือบทั้งหมดจะเป็นแม่เหล็กแบบสารตัวนำยิ่งยวด (superconducting magnet) ดังตัวอย่างในรูปที่ 1.4 เคมีคัลซิฟต์ยังแบ่งย่อยได้อีกเป็น 2 ประเภทคือ **เคมีคัลซิฟต์**

ความละเอียดต่ำ (low resolution chemical shift) และ เคมีคัลชิฟต์ความละเอียดสูง (high resolution chemical shift)

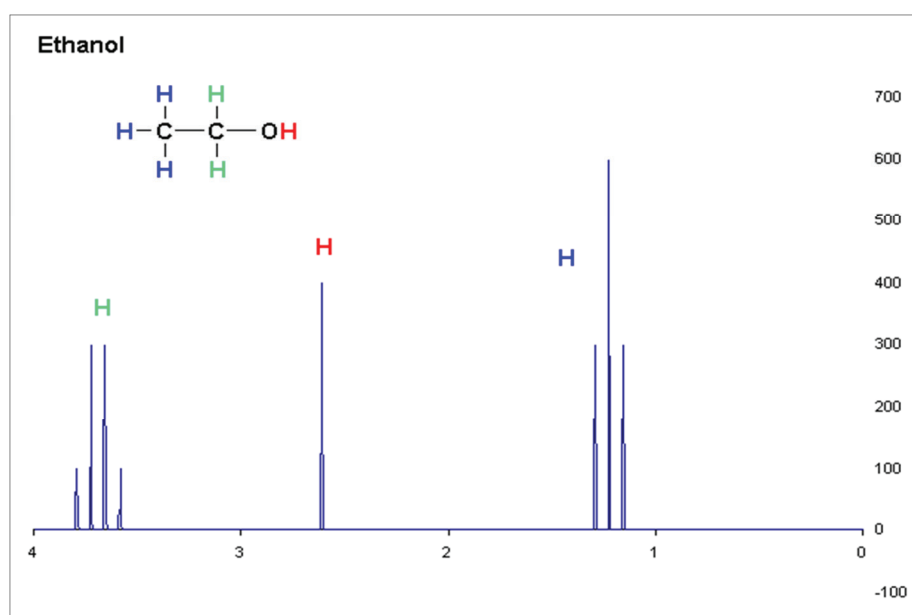


รูปที่ 1.4 เครื่อง NMR spectrometer แบบแม่เหล็กตัวนำยิ่งยวดตัวอย่าง (Jeol, 2019)

เครื่อง NMRS ที่ใช้วัดเคมีคัลชิฟต์ความละเอียดต่ำจะใช้สนามแม่เหล็กความเข้มน้อยกว่า 7 T รูปที่ 1.5 คือตัวอย่างของสเปกตรัมเคมีคัลชิฟต์ความละเอียดต่ำของโมเลกุลเอทานอล (ethanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) ในโมเลกุลเอทานอลสามารถแบ่งไฮโดรเจนออกเป็น 3 กลุ่มคือ 1) ไฮโดรเจน 3 อะตอมที่เกาะกับคาร์บอนตัวนอก 2) ไฮโดรเจน 2 อะตอมที่เกาะกับคาร์บอนตัวกลาง และ 3) ไฮโดรเจน 1 อะตอมที่เกาะกับออกซิเจน ในสเปกตรัมเคมีคัล-ชิฟต์ (รูปที่ 1.5) จะพบว่ามีพีค (peaks) อยู่ 3 พีคซึ่งเป็นของไฮโดรเจนทั้ง 3 กลุ่ม ดังนั้นจำนวนพีคจึงบอกถึงจำนวนแบบของพันธะไฮโดรเจนซึ่งในที่นี้มี 3 แบบ อัตราส่วนของพื้นที่ใต้พีคจะบอกถึงอัตราส่วนจำนวนไฮโดรเจนในแต่ละกลุ่ม จากสเปกตรัมในรูปที่ 1.5 จะพบว่าแต่ละพีคมีความกว้าง (broadening) ไม่เท่ากัน เมื่อนำโมเลกุลเอทานอลไปวิเคราะห์โดยใช้เครื่อง NMRS แบบความละเอียดสูงซึ่งใช้สนามแม่เหล็กความเข้มมากกว่า 7 T จะพบว่าพีคที่กว้างแต่ละพีคนั้นแท้จริงประกอบด้วยพีคย่อยจำนวนหนึ่งเมื่อแยกออกมาแล้วจะได้ดังรูปที่ 1.6 ซึ่งพีคย่อยเหล่านี้สามารถนำไปใช้วิเคราะห์โครงสร้างของโมเลกุลและชนิดของพันธะเคมีได้ละเอียดยิ่งขึ้น (รายละเอียดเพิ่มเติมในบทที่ 8)



รูปที่ 1.5 ตัวอย่างของสเปกตรัมเคมีคัลซิฟต์ความละเอียดต่ำของโมเลกุลเอทานอล (ethanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$)



รูปที่ 1.6 ตัวอย่างของสเปกตรัมเคมีคัลซิฟต์ความละเอียดสูงของโมเลกุลเอทานอล (ethanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$)

1.2.2. NMR ในโดเมนเวลา (Time domain NMR or TD-NMR)

การผ่อนคลายทาง NMR คือ กระบวนการกลับเข้าสู่สมดุลของระบบสปินของนิวเคลียส หลังจากถูกกระตุ้นด้วยสนามแม่เหล็กภายนอก ในกระบวนการการผ่อนคลายนิวเคลียสปลดปล่อยพลังงานออกมาในรูปของสนามแม่เหล็กที่เปลี่ยนกับเวลา สนามแม่เหล็กนี้จะเหนี่ยวนำขดลวดของ