

Исследование полевой зависимости ядерной спиновой релаксации в ультраслабых магнитных полях методом ЯМР

Жуков И. В.

Международный томографический центр СО РАН, г. Новосибирск
Новосибирский государственный университет

Зависимость времен ядерной релаксации от магнитного поля называется дисперсией. Известно, что если разность зеемановых частот ядерных спинов меньше, чем взаимодействие спинов, формируются сильно-связанные спиновые состояния, которые приходят к равновесию с общим временем релаксации [1]. Цель работы состояла в исследовании влияния гетероядер (ядер фосфора и протонов) на дисперсию для малых молекул, движение которых предполагается быстрым.

В работе впервые исследовалась полевая зависимость дисперсии ядерной релаксации спинов ^{13}P и ^1H методом ЯМР высокого разрешения с быстрым переключением поля в уникально широком диапазоне от 5 нТл до 9.4 Тл. Эксперименты проводились на ЯМР спектрометре 400 МГц, с помощью механической системы для быстрого позиционирования ампулы с образцом. Измерения релаксации проводились как в остаточном поле криомагнита, перемещая образец вдоль его оси, так и при использовании системы магнитных катушек внутри магнитного экрана, расположенного над криомагнитом, с помощью которых создавали поле от 5 нТл до 2.5 мТл. Для аденозинмонофосфата в D_2O были получены данные о зависимости релаксации от магнитного поля для 9 скалярно-связанных спинов - двух протонов пуринового основания, шести протонов рибозы и атома фосфора в фосфатной группе. Обнаружено, что в магнитных полях ниже 3 мкТл время T_1 фосфора резко спадает с 20 секунд до 1с, что обусловлено сильной связью фосфора с протонами H5' и H5'' рибозы. Для H1', H3', H4', H2, H8 в полях ниже 10 нТл наблюдаются отклонения от моноэкспоненциальной релаксации. Было проведено моделирование полевой зависимости релаксации в рамках теории Редфилда для разного числа взаимодействующих спинов. В качестве параметров расчета были использованы данные спектров ЯМР и времена релаксации в сильном поле. Результаты расчетов для 10 связанных спинов хорошо согласуются данными экспериментов.

1. A. Kiryutin et al. High-resolution study of nuclear magnetic relaxation dispersion of purine nucleotides: Effects of spin– spin coupling // Solid State Nucl. Mag. Res. 2008. V.34. pp. 142-149.

Научный руководитель – канд. хим. наук Кирютин А. С.