



ÚŘAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

POPIS VYNÁLEZU K AUTORSKÉMU OSVĚDČENÍ

(22) Přihlášeno 06 11 80
(21) (PV 7505-80)

(40) Zveřejněno 25 06 82

(45) Vydáno 15 02 85

218301
(11) (B1)

(51) Int. Cl.³
G 01 N 24/08

(75)

Autor vynálezu

HALÁMEK JOSEF ing., PÁNEK PAVEL ing., BRNO

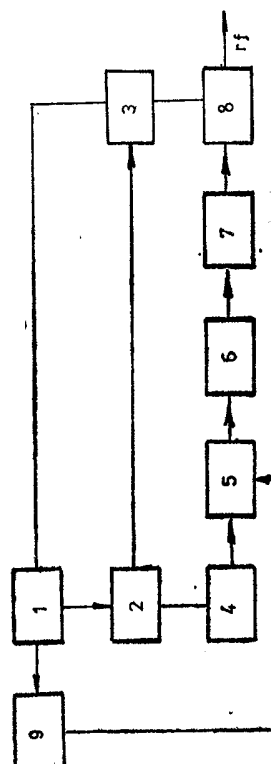
(54) Zapojení pro korelační spektroskopii nukleárně magnetické rezonance

1

Zapojení se týká oblasti měření spekter spektrometrem nukleárně magnetické rezonance.

Vynález řeší měření spekter při korelační spektroskopii. Podstatou vynálezu je, že obvod řízení je spojen jednak přes první klíčovací obvod se směšovačem a jednak přes obvod pro řízení klíčování s druhým klíčovacím obvodem. Využití vynálezu je jednoúčelové, pro korelační spektroskopii nukleárně magnetické rezonance.

2



Obr. 2

Vynález se týká zapojení pro korelační spektroskopii nukleárně magnetické rezonance.

Při měření spekter spektrometrem nukleární magnetické rezonance vyskytují se často látky, jejichž spektrum obsahuje silné nežádoucí signály. Tyto silné signály vyvolávají nežádoucí zkreslení celého výsledku měření a znemožňují vyhodnocení slabých signálů.

Z těchto důvodů se používá metody korelační spektroskopie. Toto zapojení tvoří v podstatě generátor spojený jednak přes vysílač, klíčovací obvod, sondu, přijímač se směšovačem a jednak přes druhý klíčovací obvod se směšovačem. Oba klíčovací obvody jsou spojeny se společným výstupem obvodu řízení. Výstup směšovače dává výsledný nízkofrekvenční signál. Pro vybudění spinového systému se u korelační spektroskopie užívá signál s lineárně rozmítanou frekvencí v oblasti měřeného spektra. Volbou pásma pro rozmítání frekvence je možné se vyhnout ozařování nežádoucích silných signálů. Doba jednoho průchodu spektrem se skládá ze dvou částí. Je to doba t_1 průchodu oblastí, kde jsou měřené spektrální čáry

$$t_1 = (F_2 - F_1)/a,$$

kde F_1 a F_2 jsou krajní frekvence měřené oblasti, a = rychlost rozmítání frekvence.

Dále je to doba t_2 potřebná pro dozívání vybuděného spinového systému, která se obvykle volí tak, aby nedošlo ke zkreslení spektrálních čar, tj.:

$$t_2 = 3 T_2,$$

kde $T_2 = \frac{1}{\pi \Delta\nu} a \Delta\nu$ je šířka spektrálních čar.

Při snímání spekter obsahujících silný signál uprostřed měřené oblasti je nutné snímat spektrum dvakrát. Při jednom snímání se provádí rozmítání frekvence z počáteční hodnoty F_3 přes F_4 , při druhém z počáteční hodnoty F_2 přes F_1 . Výsledná doba měření je pak dána:

$$n \times (t_1 + t_1' + 2 t_2),$$

kde n je počet akumulací.

Nevýhodou dosavadního zapojení je, že ve výsledné době měření je dvojnásobek času t_2 , přičemž t_2 je obvykle větší než $t_1 + t_1'$.

Tuto nevýhodu odstraňuje zapojení pro korelační spektroskopii nukleárně magnetické rezonance. Podstatou zapojení podle vynálezu je, že obvod řízení je ještě spojen jednak přes první klíčovací obvod se směšovačem a jednak přes obvod pro řízení klíčování s druhým klíčovacím obvodem.

Hlavní přednosti zapojení podle vynálezu je, že ve výsledné době měření je doba t_2 potřebná pro dozívání spinového systému nahrazena zkrácenou dobou měření t_3 .

Vynález blíže objasní přiložený výkres, kde na obr. 1 je graficky znázorněn směr rozmítání frekvence, na obr. 2 je blokové schéma zapojení, na obr. 3 grafické znázornění sledu klíčování k rozmítání frekvence.

Zapojení na obr. 2 tvoří obvod 1 řízení spojený jednak s prvním obvodem klíčování 3 a jednak s generátorem 2. První výstup generátoru 2 je spojen s prvním klíčovacím obvodem 3 a druhý výstup s vysílačem 4. Výstup vysílače 4 je spojen přes druhý klíčovací obvod 5, sondu 6 spektrometru, přijímač 7 se směšovačem 8, který je spojen s prvním klíčovacím obvodem 3. Druhý klíčovací obvod 5 je spojen přes obvod 9 pro řízení klíčování s obvodem 1 řízení. Výstup směšovače 8 dává výsledný nízkofrekvenční signál.

Grafické znázornění rozmítání frekvence je uvedeno na obr. 1, kde frekvence F_1 , F_2 , F_3 a F_4 probíhají v čase t_1 , t_1' , t_2 , t_2' v naznačeném směru.

V grafickém znázornění sledu klíčování k rozmítání frekvence na obr. 3 křivka — rf — naznačuje rozmítání frekvence, křivka — kp — klíčování přijímače 7 a křivka — kv — klíčování vysílače 4.

Zapojení pracuje za provozu následovně. Obvod 1 řízení provádí lineární rozmítání frekvence z hodnoty F_1 do hodnoty F_x , jak patrně na obr. 3. Během tohoto rozmítání je sepnut první klíčovací obvod 3 a je zajištěn průchod nízkofrekvenčního signálu ze směšovače 8. Informace o rozmítání frekvencí přechází do obvodu 9 pro řízení klíčování, který zajišťuje, že druhý klíčovací obvod 5 spíná mezi hodnotami frekvence F_1 až F_2 a F_3 až F_x a rozepíná mezi hodnotami F_2 a F_3 . Tento časový průběh je objasněn na grafickém obr. 3. Celková doba měření je dána vztahem

$$n \times (t_1 + t_1' + t_2 + t_3),$$

kde zkrácená doba měření $t_3 = F_3 - F_2/a$.

Výsledné zkrácení doby měření záleží na měřené látce například pro běžná spektra lze uvažovat tyto hodnoty: celková šířka spektra 1 kHz ($F_4 - F_1$), šířka výseku 50 Hz ($F_3 - F_2$), rychlost rozmítání 500 Hz/sec a šířka čar 0,3 Hz. Pak jednotlivé časy jsou $t_1 + t_1' = 1,9$ sec; $t_3 = 0,1$ sec; $t_2 = 3$ sec.

Doba jednoho průchodu při doposud užívaném zapojení je tedy 7,9 sec, při navrhaném zapojení 5 sec. Je nutné uvažovat relativní zkrácení, protože měření se pro zlepšení poměru signál/šum $n \times$ opakuje.

Časová úspora bude větší, pokud měřené spektrální čáry budou užší nebo se užije rychlejšího rozmítání. Časová úspora bude menší, pokud celková šířka spektra nebo šířka výseku bude větší.

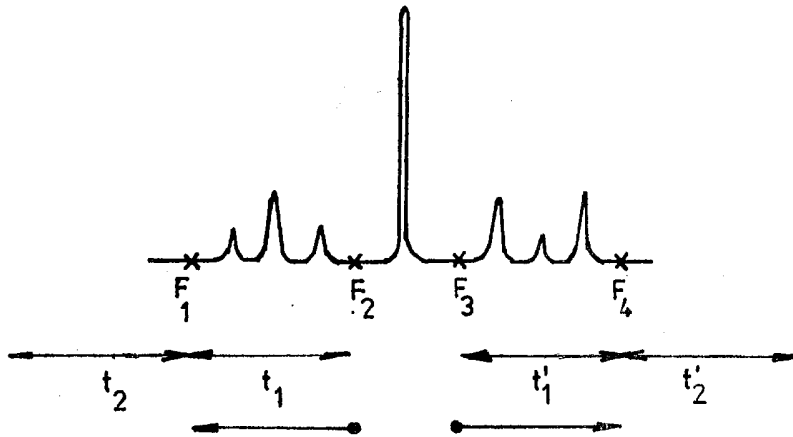
Zapojení podle vynálezu je určeno pro jednoúčelové využití v korelační spektroskopii nukleárně magnetické rezonance.

PŘEDMĚT VYNÁLEZU

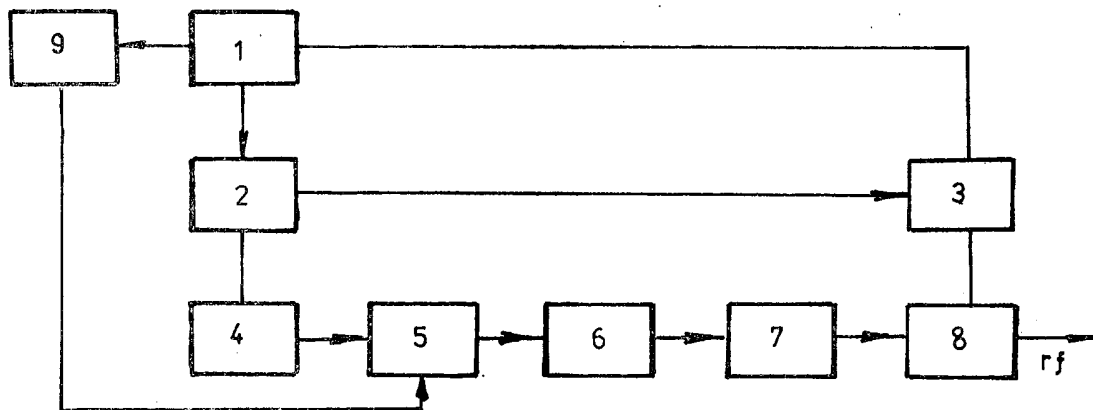
Zapojení pro korelační spektroskopii nukleárně magnetické rezonance sestávající z obvodu řízení spojeném s generátorem se dvěma výstupy, který je prvním výstupem spojen přes první klíčovací obvod se směšovačem a druhým výstupem spojen s vysílačem, jehož výstup je spojen přes druhý

klíčovací obvod, sondu spektrometru, přijímač se směšovačem, vyznačené tím, že obvod (1) řízení je ještě spojen jednak přes první klíčovací obvod (3) se směšovačem (8) a jednak přes obvod (9) pro řízení klíčování (9) s druhým klíčovacím obvodem (5).

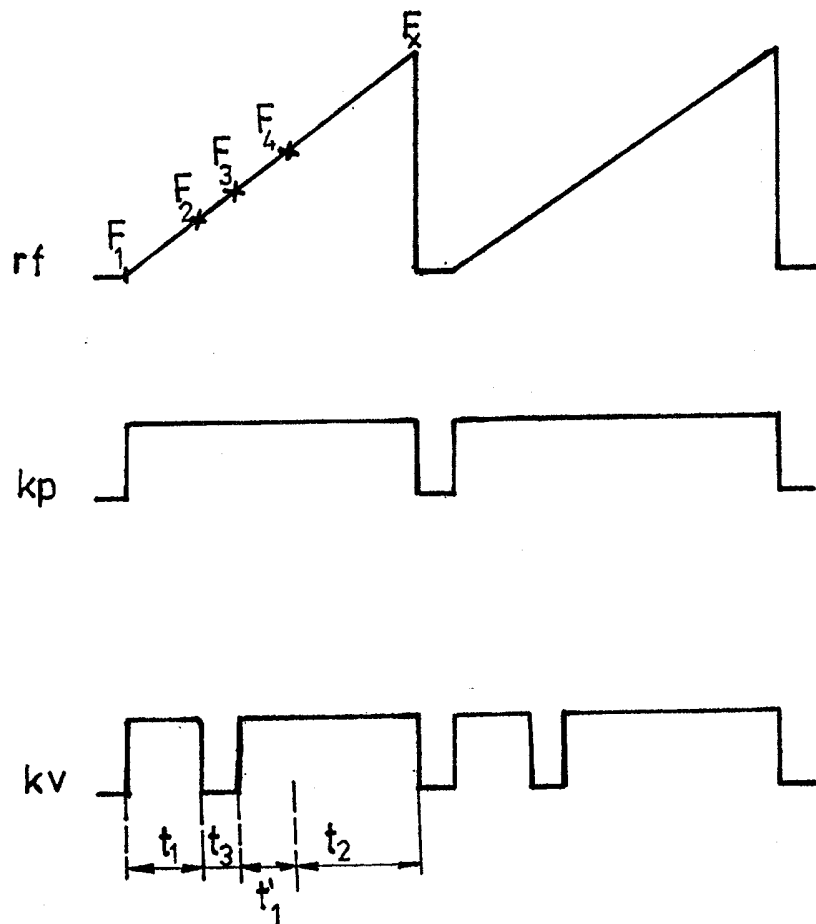
2 listy výkresů



Obr. 1



Obr. 2



Obr. 3