



核磁共振波谱仪远程操作 鉴定未知化合物的分子结构

苏州大学材料与化学化工学部
李晓虹 副教授

实验目的

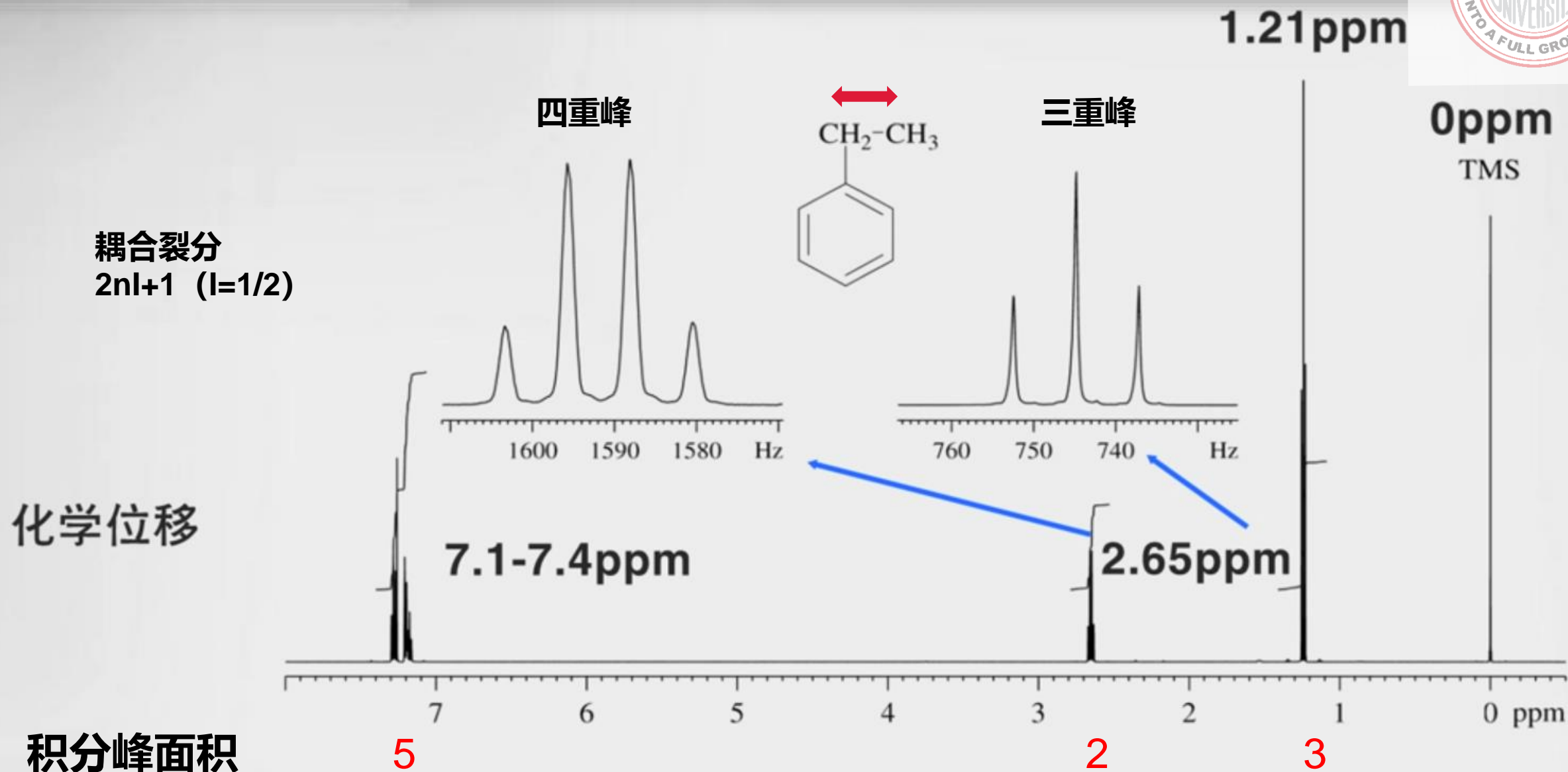


- 1. 理解核磁共振波谱法的基本原理**
- 2. 熟悉仪器结构，掌握软件远程操作方法**
- 3. 学会核磁共振波谱图的处理解析方法**
- 4. 利用核磁共振波谱测定未知样品化学结构**

**核磁共振是磁距不为0的原子核
在外磁场作用下，自旋能级发生塞
曼分裂，共振吸收某一定频率的射
频辐射物理过程。**



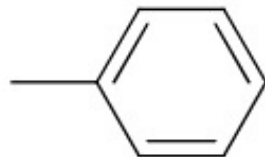
二、实验原理



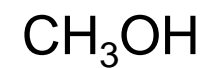
未知样品可能结构



甲苯



甲醇



丙酮



四氢呋喃



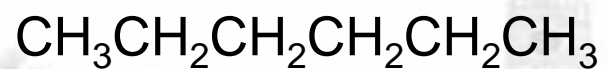
环己烷



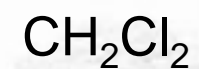
乙醇



正己烷



二氯甲烷



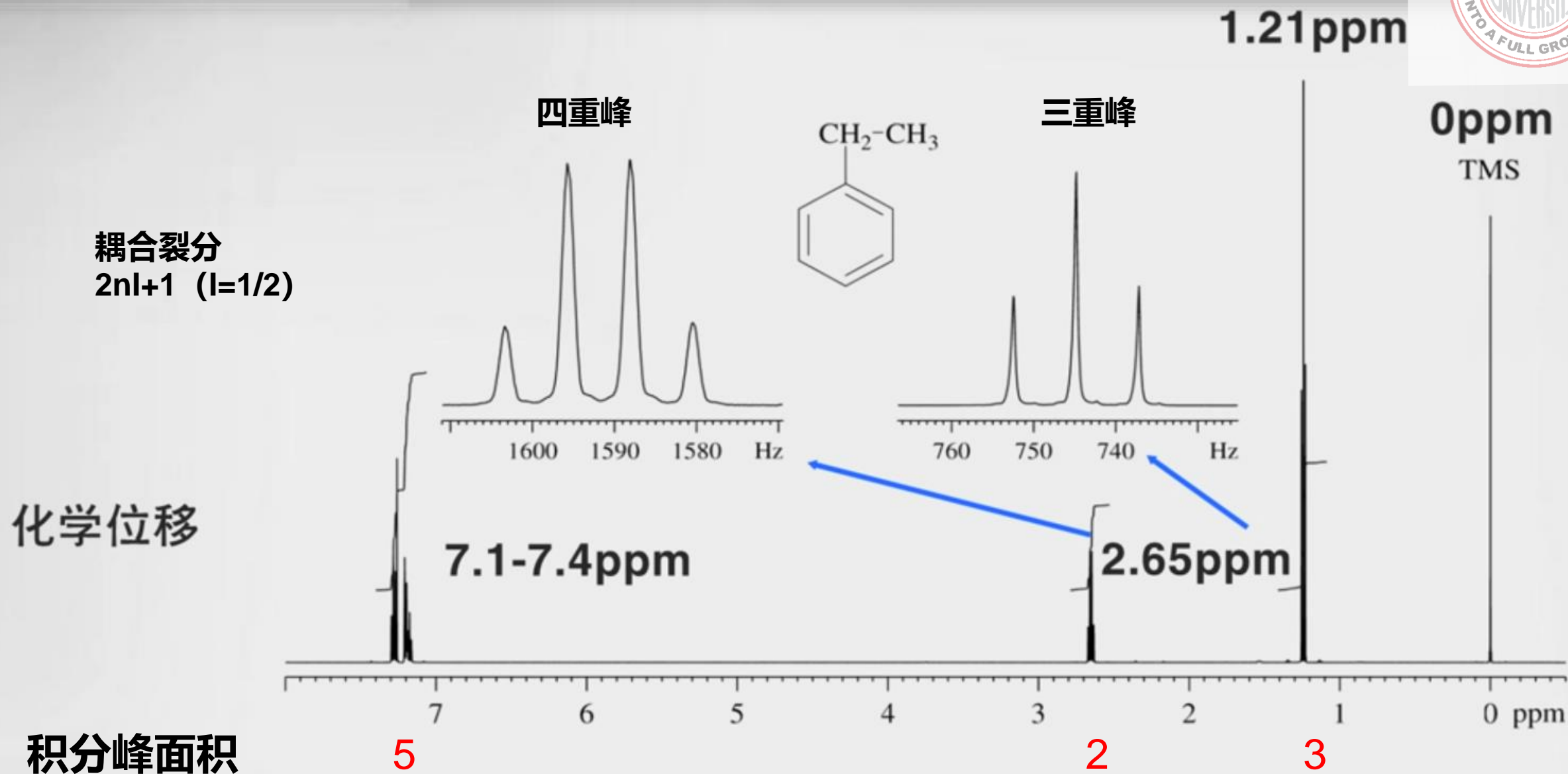
乙酸乙酯



乙醚



二、实验原理



仪器结构



600兆大型核磁共振波谱仪

共振频率：600兆赫兹

磁场强度：约14特斯拉

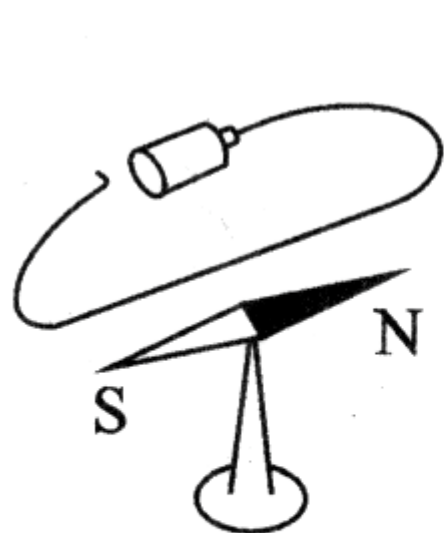
磁体

MRI

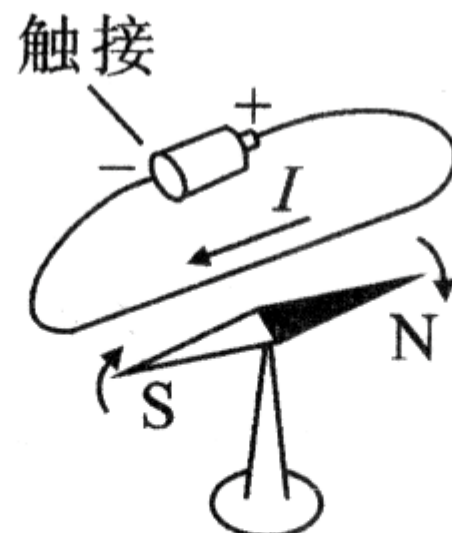
通常为3特斯拉

最高一般不超过7特斯拉

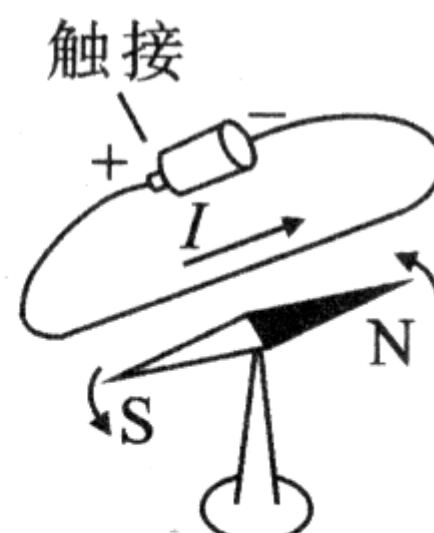
机柜



未通电
甲



通电
乙



改变电流方向
丙



**磁场的大小与缠绕线圈匝数以及通过电流
的强度成正比。**





采用了低温超导材料缠绕线圈。



它在接近绝对零度的时候会达到极高的电导率，极小的电阻，

不仅可以降低电流的损耗，提高感应磁场的稳定性。



可以降低电流通过产生的热能，避免融化线圈。

室温 298K
25 °C

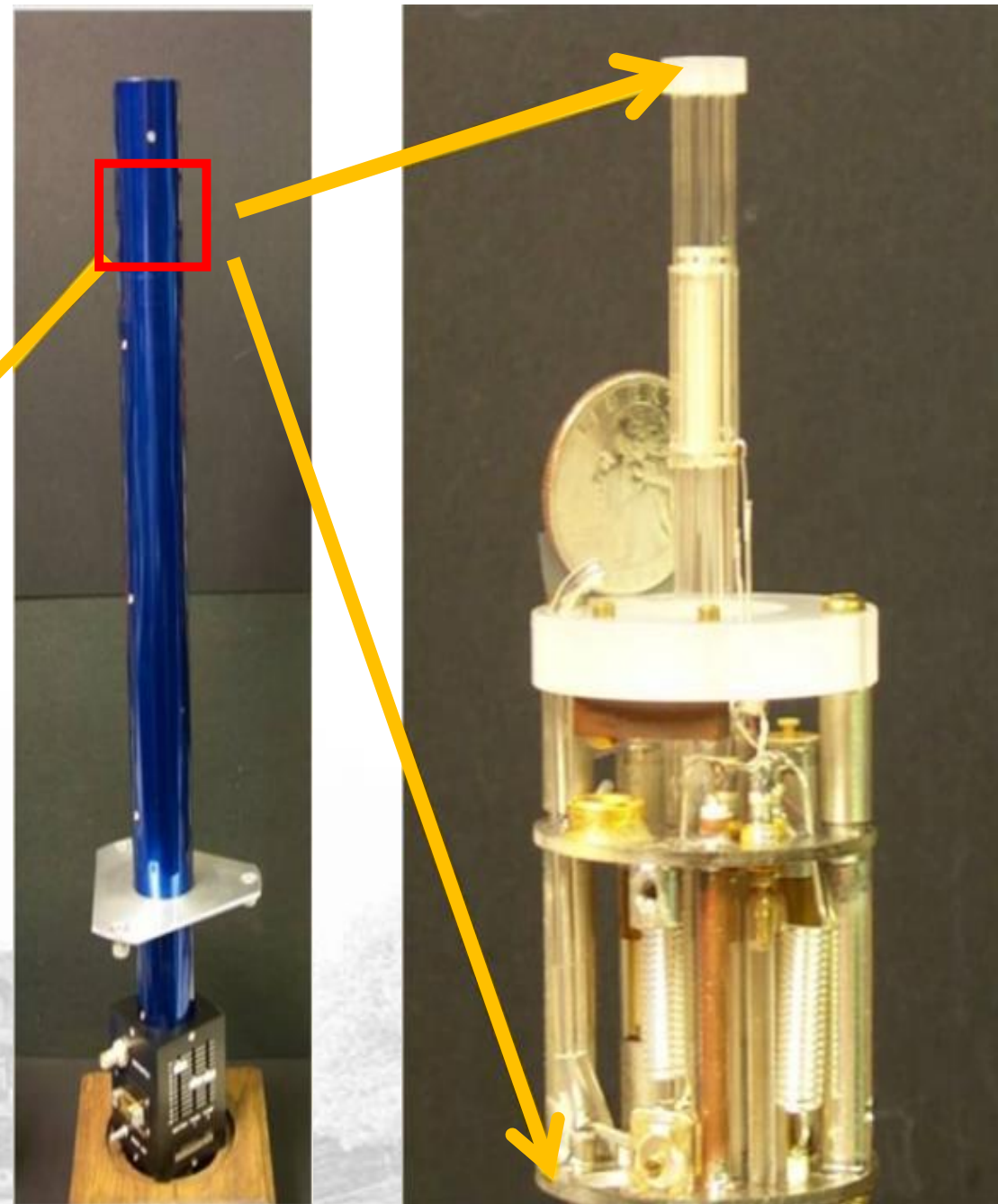
保温层 250K
-23°C

液氮 77K
-196°C

保温层 65K
-208°C

液氦 4.2K
-269°C

低温超导线圈

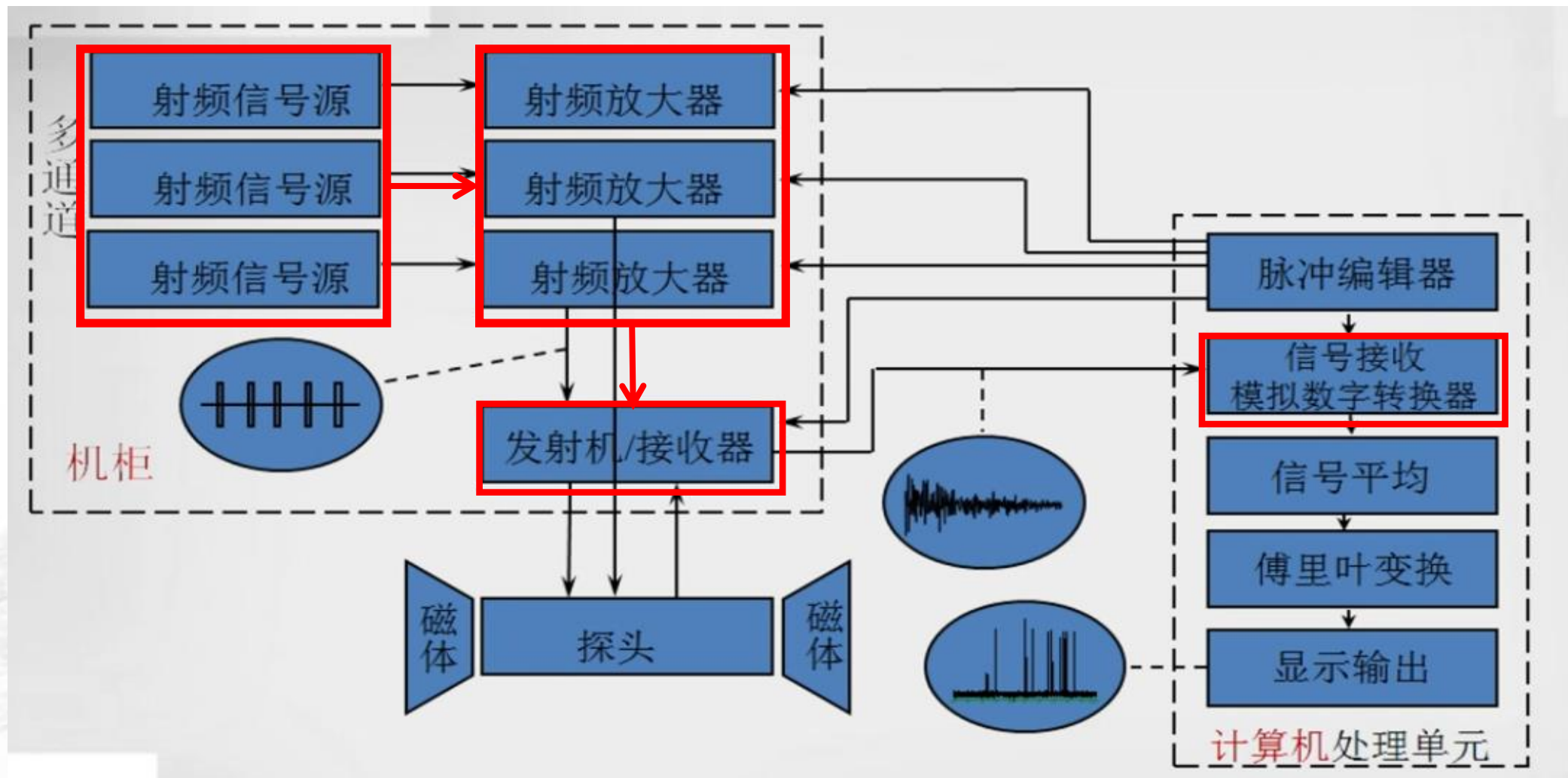


机柜内部结构



编辑，放大，传输和接收等工作

仪器结构





在计算机终端控制操作核磁仪器和接收处理谱图

通过校园网远程登录操作的本科教学实验



使用PUTTY软件创建远程操作session:

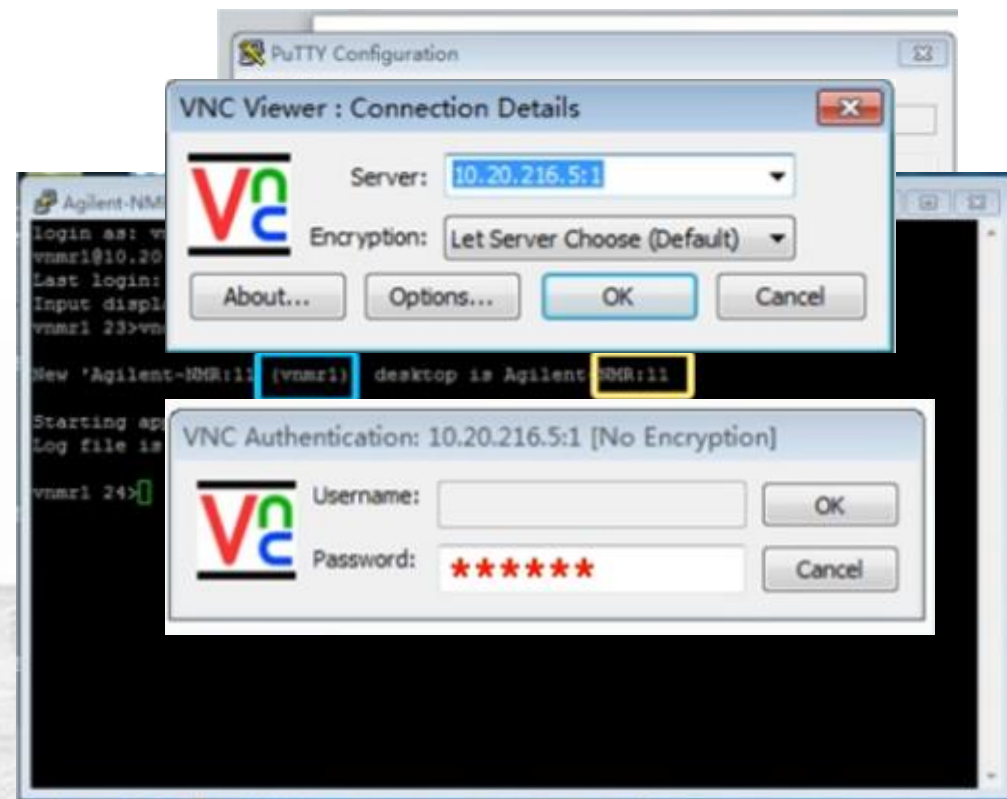
★ 红色框内输入仪器的IP地址10.20.216.5， 打开

★ 以vnmr1用户名密码登录， 在蓝色框内输入命令

vnc server

获得黄色框内创建进程的号码

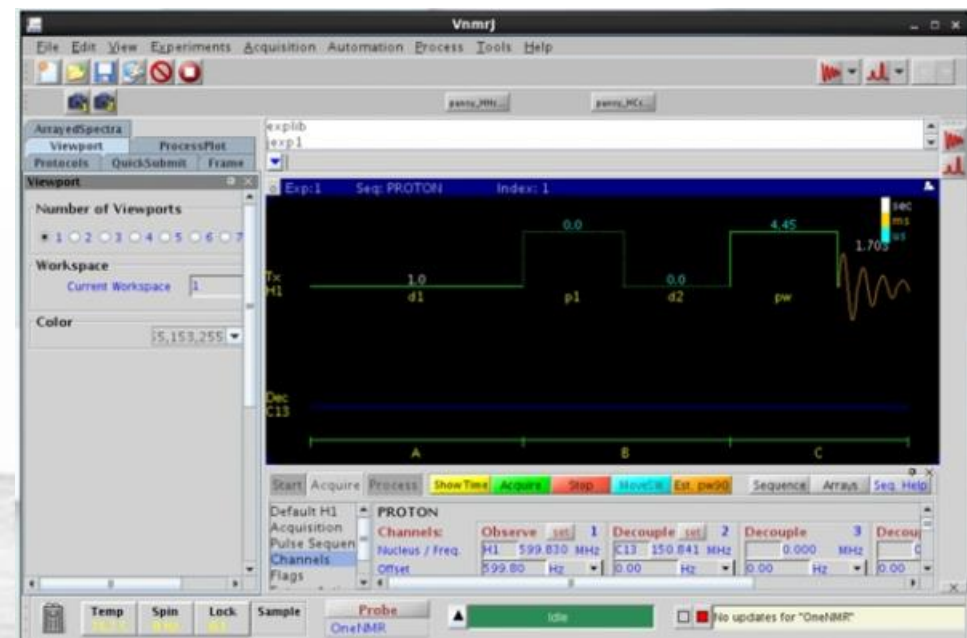
★ 打开vnc软件， 输入IP地址， 冒号， 进程号码，
点击ok输入密码



★ 双击点击屏幕上vnmrj软件的图标



★ 打开软件，操作界面如右图所示。



★ 在5毫米核磁管中滴入一滴未知样品，选取氘代氯仿为溶剂，配制溶液高度不超过5厘米的液体样品。

将样品和转子在量尺中调节到合适高度，放置于自动进样器中，记录下所放位置号。



实验内容



★ 打开vnc软件， 输入600兆核磁仪的IP地址

建立电脑操作系统与仪器的远程连接。

★ 打开vnmrj软件，按操作讲解步骤选择待测样品位置，

进样，调谐，锁场，匀场 设置氢谱采集参数，

完成采样。

★ **对采集得到谱图进行处理。**

熟练掌握相位校正，基线压平，选择参考峰定标，

标出各谱峰化学位移，对选择区域峰面积进行积分等操作。

★ **通过氢谱中各峰化学位移，峰型裂分及峰面积积分比
等信息分析未知样品结构。**



感谢观看！

T h a n k s f o r w a t c h i n g .
