

Szybkie metody Laplace'owskiego NMR badania czasozależnych procesów

Spektroskopia Magnetycznego Rezonansu Jądrowego (NMR) jest jednym z najbardziej uniwersalnych narzędzi analitycznych znanych ludzkości. Od swojego zarania w późnych latach czterdziestych dwudziestego wieku, została użyta w takich badaniach jak: chemia organiczna, kontrola leków i żywności, badania biologiczne a nawet w formie Obrazowania metodą Rezonansu Magnetycznego w diagnostyce medycznej.

Jednym z wyjątkowych zastosowań NMRu są badania materiałów niejednorodnych, takich jak np. piaskowiec, guma i inne. Tego typu materiały mają wyjątkowe znaczenie we współczesnym świecie. Dla przykładu, piaskowiec jest często nośnikiem złóż ropy naftowej. W celu badań takich materiałów powstał osobny dział NMRu zwany Laplace'owskim NMR (LNMR). Technika ta wykorzystuje w pomiarze trzy zjawiska: podłużną i poprzeczną relaksację, oraz dyfuzję. Dwa pierwsze parametry opisują jak spin jądra powraca do równowagi, ostatni zaś opisuje jak szybko molekula porusza się w próbce. Właściwości te są niezwykle czułe na otoczenie i przez to pozwalają na badania różnych materiałów.

Potencjał LNMR znacząco wzrasta wraz z rozszerzeniem widma na dwa wymiary, tworząc mapy korelacyjne między relaksacjami oraz współczynnikiem dyfuzji. Tego typu mapy zawierają znacząco więcej informacji, niestety kosztem czasu pomiaru. Każdy punkt drugiego wymiaru (zwanego pośrednim) jest mierzony poprzez powtórzenie całego pomiaru ze zmienionym jednym parametrem. Powoduje to, że niekiedy potrzeba godzin by zmierzyć pojedynczą mapę. Uniemożliwia to niestety wykorzystanie dwuwymiarowego LNMR do badania czaso-zależnych procesów jak na przykład reakcja chemiczna.

Celem niniejszego projektu jest umożliwienie stosowania dwuwymiarowych pomiarów LNMR dla monitorowania reakcji oraz innych procesów czaso-zależnych. Zostanie to osiągnięte poprzez zastosowanie dwóch nowych technik umożliwiających ominięcie problemu długiego czasu pomiaru. Techniki te to:

1. Ultraszybki Laplace'owski NMR (Ultra-fast Laplace NMR - UF-LNMR)
2. Czasorozdzielczy Laplace'owski NMR (Time-resolved Laplace NMR - TR-LNMR)

Pierwsza technika, bazuje na zakodowaniu pośredniego wymiaru wzdłuż próbki. Dzięki temu za pomocą pojedynczego pomiaru można odczytać oba wymiary mapy. Pozwala to na skrócenie czasu mierzenia do sekund. Dzięki temu poprzez wielokrotne powtarzanie pomiaru staje się możliwa obserwacja zmian w próbce w funkcji czasu.

Druga technika zwana też kroczącą klatką, bazuje na klasycznym kodowaniu drugiego wymiaru. Jednakże, punkty pośrednie są mierzone losowo i pomiar powtarza się podczas czasu trwania całej reakcji (lub innego badanego procesu). Następnie po pomiarze zmierzone dane dzieli się na małe podzbiory (klatki), które wzajemnie na siebie zachodzą. Przez to, że każda klatka odpowiada średniemu czasowi jej pomiaru i krok między klatkami jest nieduży, można prześledzić przebieg badanego procesu z wysoką rozdzielczością czasową.

Wykorzystanie obu tych technik umożliwi zastosowanie dwuwymiarowego LNMR do badań procesów, których nie można było wcześniej zbadać za pomocą LNMR. Pozwoli to lepiej zrozumieć takie procesy jak kataliza heterogeniczna, absorpcja, procesy polimeryzacji i wiele innych.

Metody te zostaną użyte przede wszystkim do zrozumienia mechanizmów ważnych w przemyśle takich jak: hydrogenacja czy polimeryzacja.

Dodatkowo, szybki LNMR zostanie wykorzystany do badania innych czasozależnych procesów, taki jak: produkcja żywności, absorpcja, reakcje w cieczach jonowych, polimeryzacja.