

18:00-18:15

Optimizacija tuljav pri kvantitativnih meritvah z jedrsko kvadrupolno resonanco

Vojko Jazbinšek, Janez Pirnat in Zvonko Trontelj

Inštitut za matematiko, fiziko in mehaniko, Jadranska 19, Ljubljana, Slovenija.

Jedrska kvadrupolna resonanca (Nuclear Quadrupole Resonance, NQR) je radiofrekvenčna (RF) spektroskopska metoda, ki podobno kot jedrska magnetna resonanca (NMR) meri prehode med energijskimi nivoji atomskih jeder v preiskovani snovi. Medtem ko pri NMR resonančno frekvenco določa predvsem interakcija z zunanjim magnetnim poljem, pri NQR resonanco določa interakcija med električnim kvadrupolnim momentom atomskega jedra in gradientom električnega polja bližnjih valenčnih elektronov, zato pri tej metodi niso potrebni veliki in dragi superprevodni magneti. Pri obeh metodah je intenziteta izmerjenega signala sorazmerna številu resonančnih atomskih jeder, kar omogoča kvantitativno analizo vzorcev (maso, razmerja različnih kristaliničnih faz, stopnjo hidratacije, ali pa razmerje med kristalinično in amorfno fazo). Na King's College London so npr. potrdili [1], da lahko z NQR meritvami zanesljivo detektirajo vrsto in ugotovijo število tablet v originalno zaprti embalaži zdravila. Pogoj za takšno kvantitativno analizo vzorcev je približno homogeno RF polje na področju vzorca. V [1] so to dosegli s tuljavo pravokotnega profila z optimiziranimi neenakomernimi razdaljami med posameznimi ovoji.

V tem prispevku smo obravnavali dve vrsti tuljav: a) ploščate, pri katerih želimo imeti čim bolj homogeno polje na določeni oddaljenosti od tuljave, in b) valjaste tuljave, pri katerih želimo imeti čim bolj homogeno polje v celotni prostornini tuljave. V prvem približku smo ovoje tuljav predpostavili kot zaporedje krožnih zank, pri končnem izračunu pa smo a) ploščate tuljave sestavili v obliki spirale, pri kateri se oddaljenost od središča zvezno spreminja s polarnim kotom, in b) valjaste v obliki vijačnice, pri kateri se korak ovoja zvezno spreminja s polarnim kotom. Tako smo na primer z optimizacijo razdalj med posameznimi ovoji valjaste tuljave, ki je imela dolžino enako dvakratnemu premeru in 21 ovojev, povečali prostornino, v kateri je bilo magnetno polje večje kot 95% maksimalne vrednosti polja, z manj kot 50% na več kot 80% celotne prostornine tuljave.

[1] J. Barras *et al.*, *Analit. Chem.* **84**, 8070 (2012).