

## Обзор возможностей ЯМР-спектрометра X-Pulse фирмы Oxford Instruments – какие ядра уже могут быть измерены стандартно, какие ядра можно измерять потенциально

Список ядер основан на заявленных пределах широкополосной частоты  $^{29}\text{Si}$  -  $^{31}\text{P}$  и охватывает все ядра в этом диапазоне без ограничений, на основании данных проведенных измерений. Колонка *Примечания* дает некоторое представление о практике применения, учитывая физические свойства ядер и их естественное содержание и указывается относительно углерода-13 (*данные из: Pure Appl. Chem., 2001, 73, 1795-1818.*)

В общем случае ядра со спином  $1/2$  будут наиболее полезными. Квадрупольные (то есть со спином больше  $1/2$ ) ядра также могут иметь применение, но, как правило, имеют более широкие линии, особенно в более крупных молекулах, что ограничивает их полезность. Металлы обычно ограничиваются соединениями, в которых атом металла находится в состоянии диамагнитного окисления.

Для любого из менее распространенных ядер (перечисленных в разделе «Другие ядра»), пожалуйста, проконсультируйтесь с командой разработчиков относительно возможности применения аппарата X-Pulse.

Обратите внимание, что очень часто запрашиваемым ядром, на которое НЕ распространяются текущие возможности широкополосности X-Pulse, является N-15. Изотопы азота находятся за пределами частотного диапазона аппарата. Более того,  $^{15}\text{N}$  ЯМР непрактичен в слабом поле без использования дорогих обогащенных соединений или гиперполяризации.

### Ядра, применимые для X-Pulse

Изотопы	Спин	Природное содержание (%)	Частота Лармора @ 1.41 Т (МГц)	Относительная восприимчивость (по сравнению с $^{13}\text{C}$ )	Примечания
H-1 (протон)	1/2	99,99	60,01	5870	на канале $^1\text{H}/^{19}\text{F}$
F-19	1/2	100	56,47	4900	на канале $^1\text{H}/^{19}\text{F}$
Li-7	3/2	92,41	23,32	1590	Чувствительность лучше, чем $^6\text{Li}$ , но линии широкие (шире, чем $^6\text{Li}$ )
B-11	3/2	80,1	19,25	777	Чувствительность более, чем $^{10}\text{Li}$ , широкие линии. Предпочтительны кварцевые ЯМР-пробирки
C-13	1/2	1,07	15,90	1,00	
Na-23	3/2	100	15,87	545	
Al-27	5/2	100	15,64	1220	

Si-29	1/2	4,685	11,92	2,16	Стеклянные и кварцевые ЯМР-пробирки могут давать интерференцию - часто требуется измерение бланка и его вычитание
P-31	1/2	100	24,29	391	
Co-59	7/2	100	14,24	1640	Широкие линии: можно наблюдать только низко-спиновые компоненты Co(I) или Co(III)

### Другие ядра

Ниже приведена таблица возможностей применения аппарата X-Pulse на ядрах вне пределов  $^{29}\text{Si}$  -  $^{31}\text{P}$ .

Обратите внимание, что ядра, отмеченные желтым цветом, слишком токсичны, чтобы их можно было проверить на Oxford Instruments. Тем не менее, производитель мог бы проанализировать менее токсичные соли этих ядер по запросу, чтобы продемонстрировать, что они будут работать. Среди них есть довольно интересные ядра, например, алюминий добавляется в вакцины для стимуляции иммунной системы, часто используется в ветеринарии и может потребовать количественной оценки. Алюминий также используется в графитовых батареях.

#### *Цветовая индикация комментариев производителя:*

Радиоактивные изотопы с длительным периодом полураспада или крайне нестабильные соединения. Oxford Instruments не может работать с этими соединениями.

Соединения этих элементов обычно очень токсичны. Oxford Instruments не смог проверить эти ядра. Тем не менее, потенциально прибор применим к этим ядрам.

Потребуется модификация оборудования для измерения на X-Pulse

Возможно, но может потребоваться значительная работа

Должно быть легко достижимо на X-Pulse

Изотопы	Спин	Природное содержание (%)	Частота Лармора @ 1.41 Т (МГц)	Относительная восприимчивость (по сравнению с $^{13}\text{C}$ )	Примечания
<b>H-2 (дейтерий)</b>	1	0,0115	9,21	0,00652	потенциально возможно на LOCK-канале с пользовательской

					пробой: нужны обогащенные образцы
<b>Sc-45</b>	7/2	100	14,58	1780	
<b>V-51</b>	7/2	99,75	15,79	2250	
<b>Mn-55</b>	5/2	100	14,88	1050	Широкие линии: на маленьких молекулах ОК в окислительных состояниях Mn(-I), Mn(0), Mn(I), Mn(VII).
<b>Co-63</b>	3/2	69,15	15,91	382	Широкие линии
<b>Co-65</b>	3/2	30,85	17,05	208	Широкие линии
<b>Ga-69</b>	3/2	60,108	14,40	246	Очень широкие линии
<b>Ga-71</b>	3/2	39,892	18,30	335	Очень широкие линии
<b>Br-79</b>	3/2	50,69	15,04	237	Очень широкие линии
<b>Br-81</b>	3/2	49,31	16,21	288	Очень широкие линии
<b>Rb-87</b>	3/2	27,83	19,64	290	Радиоактивен
<b>Nb-93</b>	9/2	100	14,69	2870	
<b>Tc-99</b>	9/2	нет данных	13,51	-	Радиоактивен
<b>Cd-111</b>	1/2	12,80	12,73	7,27	
<b>Cd-113</b>	1/2	12,22	13,32	794	Радиоактивен
<b>In-113</b>	9/2	4,29	13,12	88,5	
<b>In-115</b>	9/2	95,71	13,15	1980	Радиоактивен
<b>Sn-115</b>	1/2	0,34	19,64	0,711	
<b>Sn-117</b>	1/2	7,68	21,38	20,8	
<b>Sn-119</b>	1/2	8,59	22,38	26,6	Предпочтительное ядро для олова из-за чувствительности
<b>Sb-121</b>	5/2	57,21	14,36	548	
<b>Te-123</b>	1/2	0,89	15,71	0,961	
<b>Te-125</b>	1/2	7,07	18,93	13,4	
<b>I-127</b>	5/2	100	12,01	560	
<b>Xe-127</b>	1/2	26,4	16,69	33,6	
<b>Pr-141</b>	5/2	100	18,37	-	
<b>Eu-151</b>	5/2	47,81	14,92	-	
<b>Tb-159</b>	3/2	100	14,43	-	
<b>Ho-165</b>	7/2	100	12,68	-	
<b>Re-185</b>	5/2	37,4	13,52	305	
<b>Re-187</b>	5/2	62,6	13,65	526	Радиоактивен
<b>Pt-195</b>	1/2	33,832	12,90	20,7	Средняя чувствительность, узкие линии, широкий диапазон химического сдвига (chemical shift)

<b>Pb-207</b>	1/2	22,1	12,56	11,8	Средняя чувствительность, узкие линии, широкий диапазон химического сдвига (chemical shift)
<b>Po-209</b>	1/2	нет данных	14,64	-	Радиоактивен
<b>Pa-231</b>	31/2	100	14,4	-	Радиоактивен