ETH zürich

Institut für Molekulare
Physikalische Wissenschaft
(IMPS)

Departement für
Chemie und Angewandte
Biowissenschaften
(D-CHAB)

ETH Zürich

magnETHical: Ein günstiges NMR-Spektrometer für die Lehre

magnETHical

Takuya Segawa
segawat@ethz.ch
Leitung Laborpraktika in Physikalischer Chemie
D-CHAB, ETH Zürich

D CHAB

magnETHical

Das Team



Maximilian Stabel
Doktorand
Inst. Mol. Phys. Wissenschaft
D-CHAB, ETH Zürich

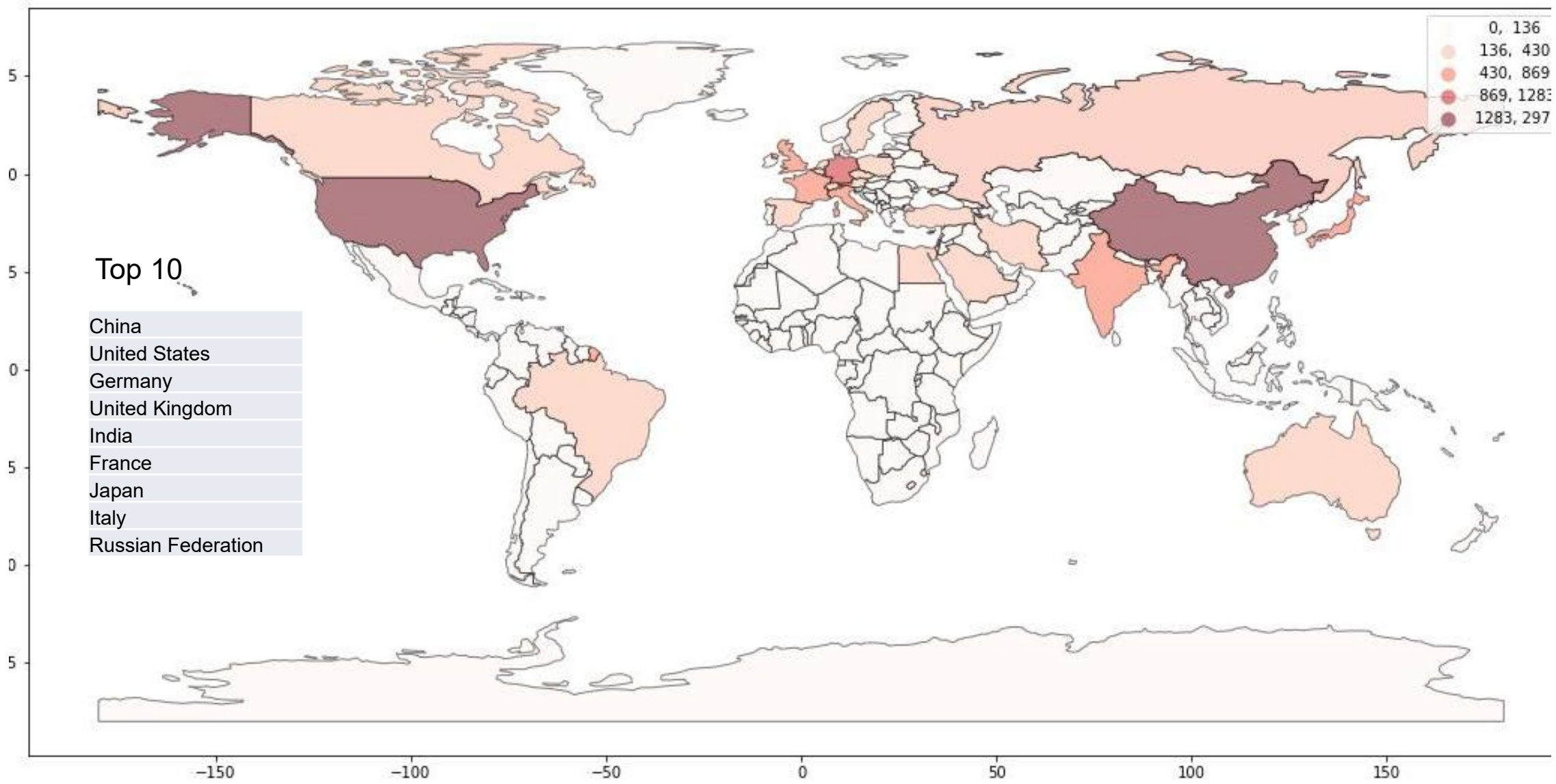


Prof. Sebastian Kozerke
Inst. Biomed. Engineering
D-ITET, ETH Zürich



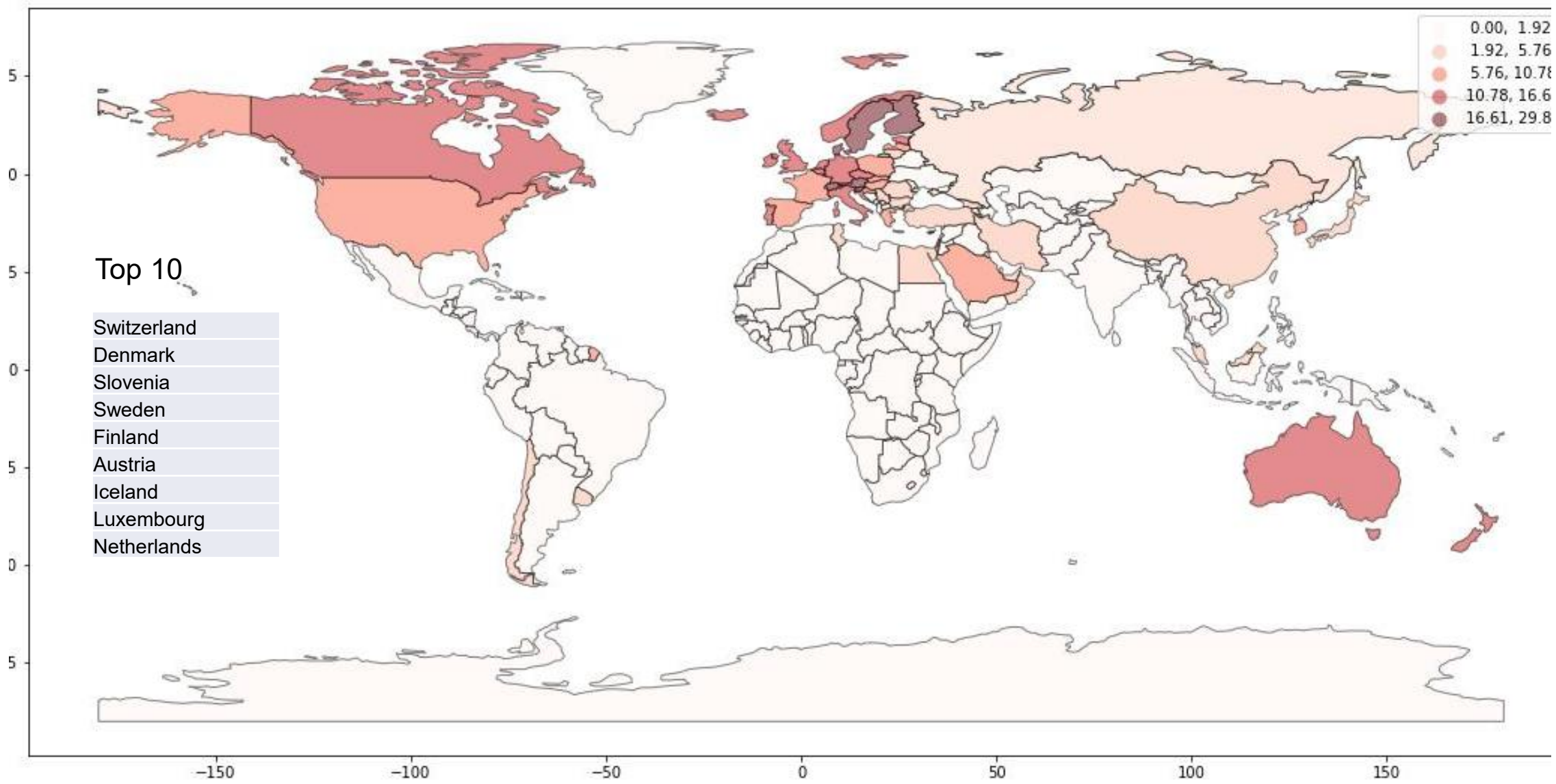
Prof. Roland Riek
Inst. Mol. Phys. Wissenschaft
D-CHAB, ETH Zürich

Die NMR Weltkarte



Citations in Scopus (2021), keyword = NMR, by Maria Pechlaner (Infozentrum, ETH Zürich)

Die NMR Weltkarte *pro Kopf*



Citations in Scopus (2021), keyword = NMR, by Maria Pechlaner (Infozentrum, ETH Zürich)

NMR fehlt im «Globalen Süden» weil…

Kein NMR, weil…

- …Anschaffungskosten sind viel zu teuer
- …Unterhaltskosten sind auch zu teuer
- …kein Zugang zu flüssigem Helium

Ohne NMR Spektroskopie…

- … keine chemische Strukturbestimmung
- …keine leichtzugänglichen Quanten-Experimente
- …Ausschluss aus einer bereits 80-jährigen Technologie

Für einen Wandel brauchen wir…

- …ein günstiges NMR Spektrometer
- …ein NMR-Spektrometer ohne Cryo-Gase
- …ein **open-source** NMR Spektrometer bzw. NMR Community

Nuclear Induction

F. Bloch, W. W. Hansen, and Martin Packard
Stanford University, Stanford University, California
January 29, 1946

Resonance Absorption by Nuclear Magnetic Moments in a Solid

E. M. Purcell, H. C. Torrey, and R. V. Pound*
Radiation Laboratory, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts
December 24, 1945

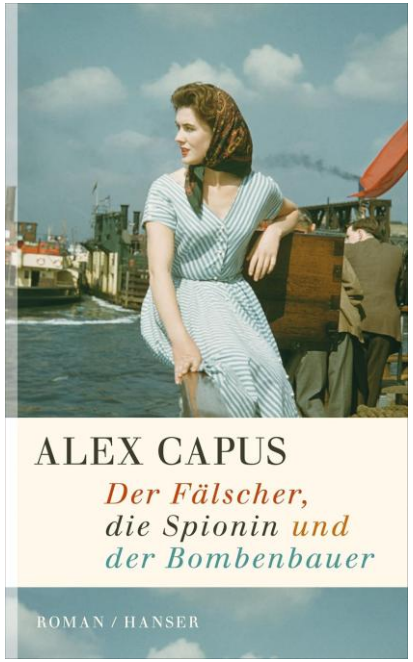
Eine kleine Schweizer/ETH-Geschichte der NMR-Spektroskopie…
…durch die Nobelpreise

Physik, 1952



Felix Bloch

Erstes NMR-Spektrum von Wasser



Chemie, 1991



Richard R. Ernst

«Für die hochaufgelöste NMR-Spektroskopie»
- *Fourier-Transform NMR*
- *2D NMR*

Chemie, 2002



Kurt Wüthrich

NMR von Biomolekülen: 3D Struktur



Können wir ein NMR-Spektrometer für CHF 10’000 bauen?

NMR Spektrometer mit supraleitendem Magnet: 200 – 1200 MHz

Starker Magnet:

1. Mehr NMR-Signal
2. Höhere NMR-Auflösung
   (Peaks sind besser separiert)



Preis:

Grössenordnung:

CHF 1’000’000

Das Benchtop NMR-Spektrometer: Eine neue Klasse der NMR-Spektrometer

Magritek, Spinsolve 60, 80, 90, 100 MHz



Bruker, Fourier 80 MHz



- Spinsolve Serie, auf dem Markt seit 2012

→ Permanentmagnete (“Supermagnete”) statt supraleitender Elektromagnet

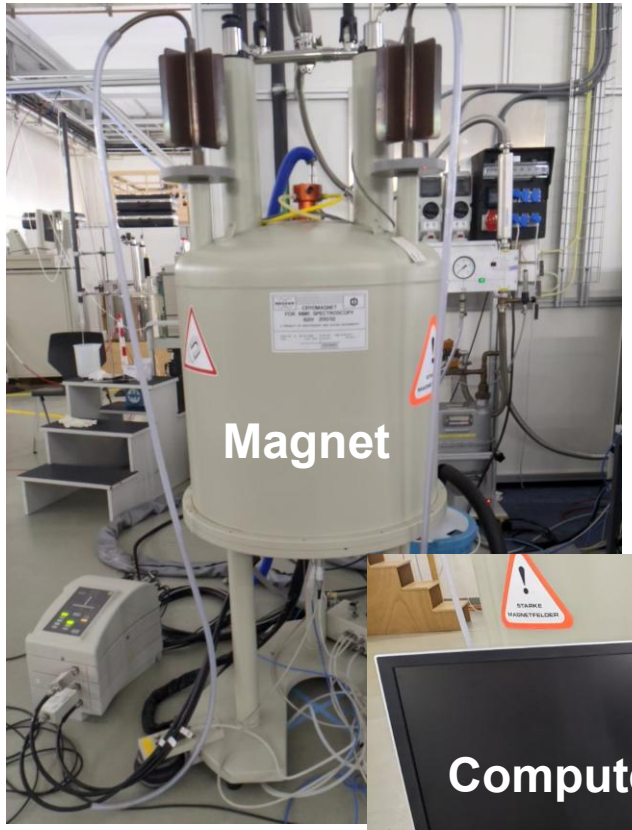
- Preis: Grössenordnung CHF 100’000
- Betriebskosten: niedrig
- Kein Flüssiggas (Helium, Stickstoff) notwendig
- Kein deuteriertes Lösungsmittel notwendig (Dank Lock auf eingebautem ^{19}F-Sample)



Können wir ein NMR-Spektrometer für CHF 10’000 bauen?

NMR Spektrometer: Die Bauteile









Die Konsole



Senden von Radio-Pulsen

Detektion on Radio-Signalen

Die NMR-Konsole im Kreditkartenformat

MaRCoS MRI
(MAgnetic Resonance COntrol System)

https://github.com/marcos-mri/


Prof. Joseba Alonso


Dr. Vlad Negnevitsky

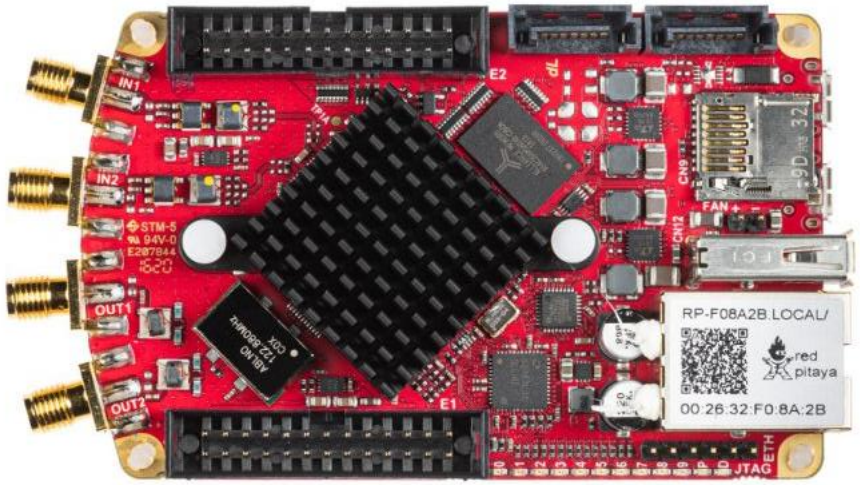
Software-defined radio (SDR) für Radioamateure benutzen: https://redpitaya.com/sdrlab-122-16/

SDR Lab von Red Pitaya (Slowenien)

EUR 750

- Micro-Computer (Kreditkarten gross) wie Rasberry Pi…
- USB / Ethernet / WLAN Verbindung zu PC / Smartphone
- Software auf einer SD Speicherkarte (austauschbar)

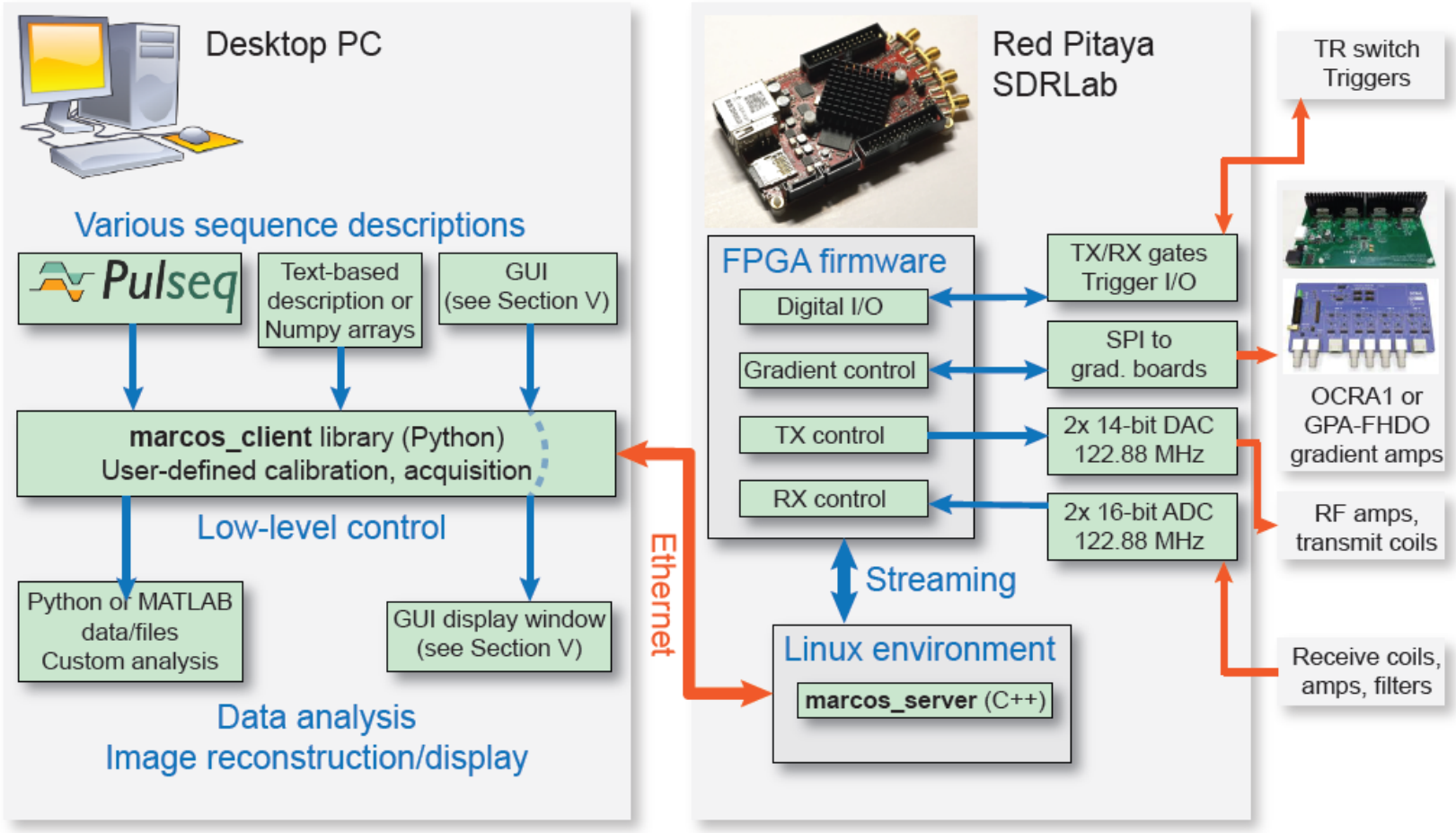
+ FPGA: Digital Signal Processing
+ 2 RF Ausgänge (16-bit Auflösung)
+ 2 RF Eingänge (14-bit Auflösung)
+ Maximale Radiofrequenz (RF): 122.88 MHz



MaRCoS – “Red Pitaya” als Konsole

→ Unsere NMR Konsole! ✓

Steuerung des Spektrometers via Python / JupyterNotebooks



V. Negnevitsky et al., J. Magn. Reson, 350:107424 (2023) https://doi.org/10.1016/j.jmr.2023.107424

Der Magnet



Ein starkes Magnetfeld ist das eine…

…es muss aber vor allem *extrem* homogen sein!

NMR Spektroskopie: Es geht um klitzekleine Unterschiede!

Wichtigste NMR-Gleichung:

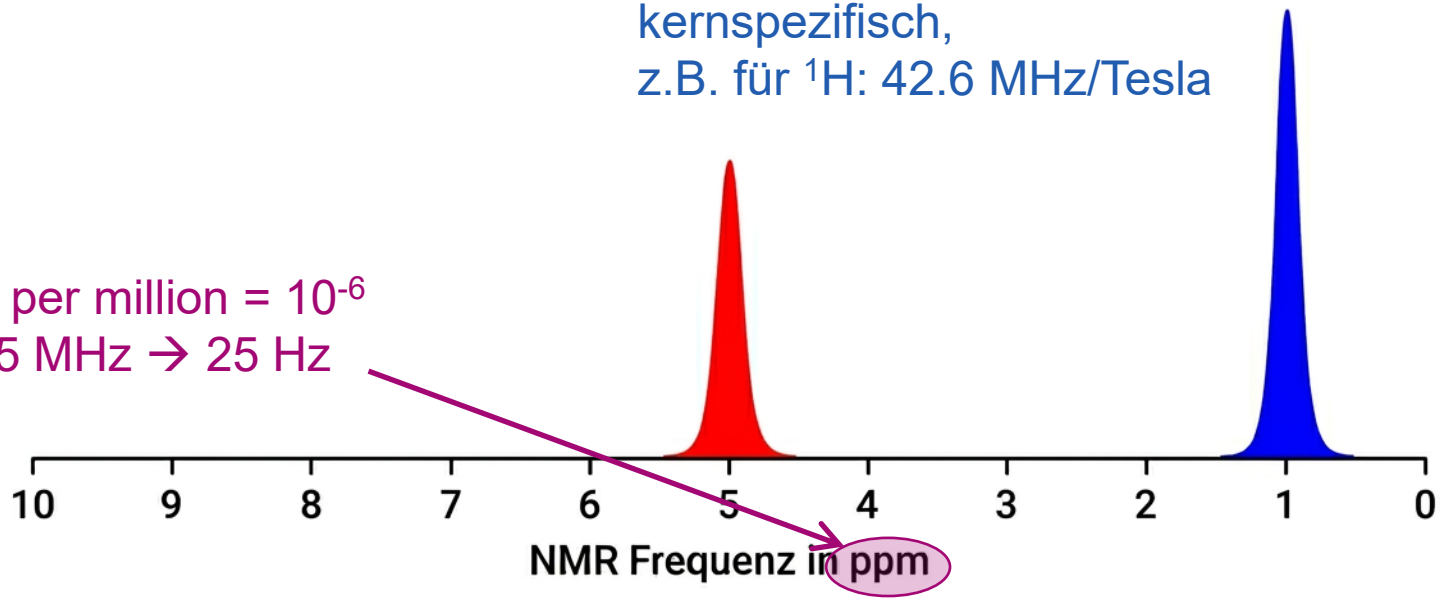
$$\omega = \gamma B$$

NMR-Frequenz
Larmor-Frequenz
Präzessionsfrequenz:
z.B. 25 MHz oder 600 MHz

Magnetfeld
z.B. 0.6 Tesla
oder 14 Tesla

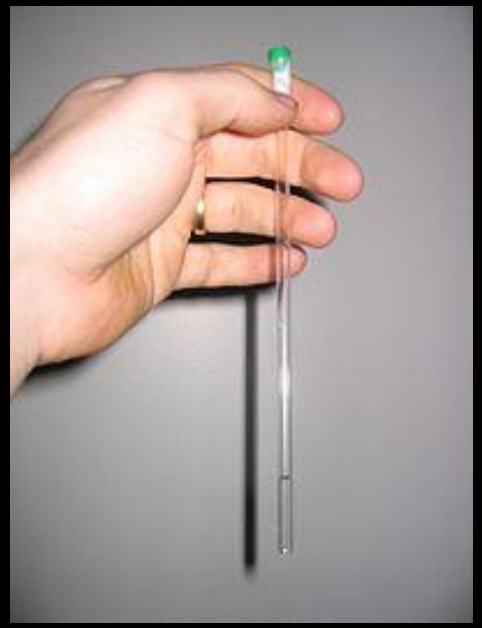
Gyromagnetisches Verhältnis
«Proportionalitätskonstante»
kernspezifisch,
z.B. für ^{1}H: 42.6 MHz/Tesla

ppm = parts per million = 10^{-6}
1 ppm bei 25 MHz → 25 Hz



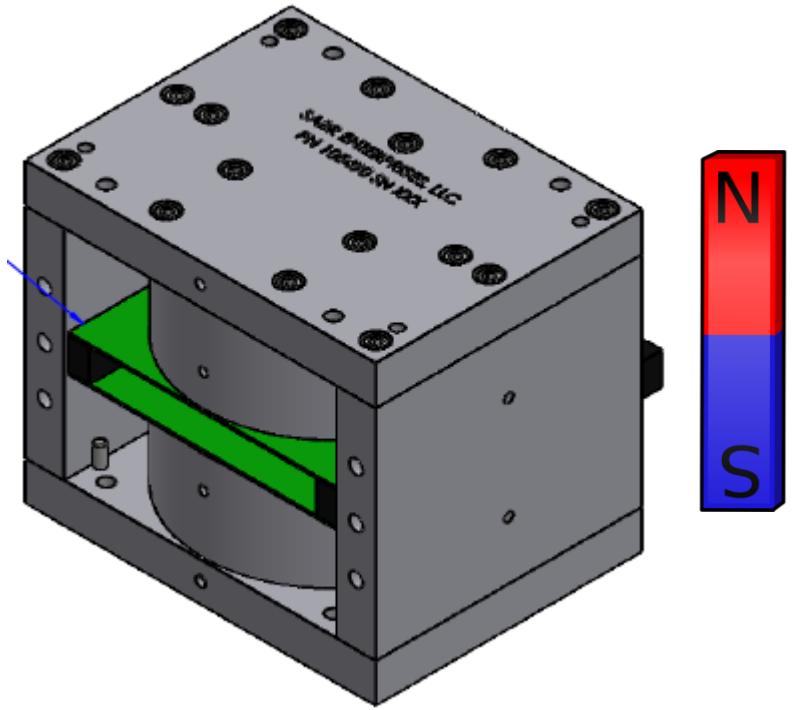
(Generiert mit Google Gemini)

Magnetfeld muss an jedem Ort der Probe bis auf 10^{-7} gleich sein!!!



Der Magnet: 0.6 Tesla für ein 25 MHz ^{1}H NMR Spektrometer

Von SABR Enterprises, LLC (Boston, USA)



Volumen:
- Für ein 5 mm NMR-Röhrchen

Homogenität (mit Shim-Spulen):
- 0.1 ppm → 2.5 Hz bei 25 MHz

Magnetmaterial:
- temperaturkompensierte Samarium-Cobalt Legierung
  → -50 ppm/Kelvin (*sehr wenig!*)

Gewicht:
- ca. 5 kg

Masse:
- ca. 10 cm x 10 cm x 10 cm

Preis für einen Magnet (N = 10)
- USD 8,500.00 + VAT

Ca. CHF 1000 bleiben für den Rest des Spektrometers!

Radiofrequenz- und elektronische Bauteile

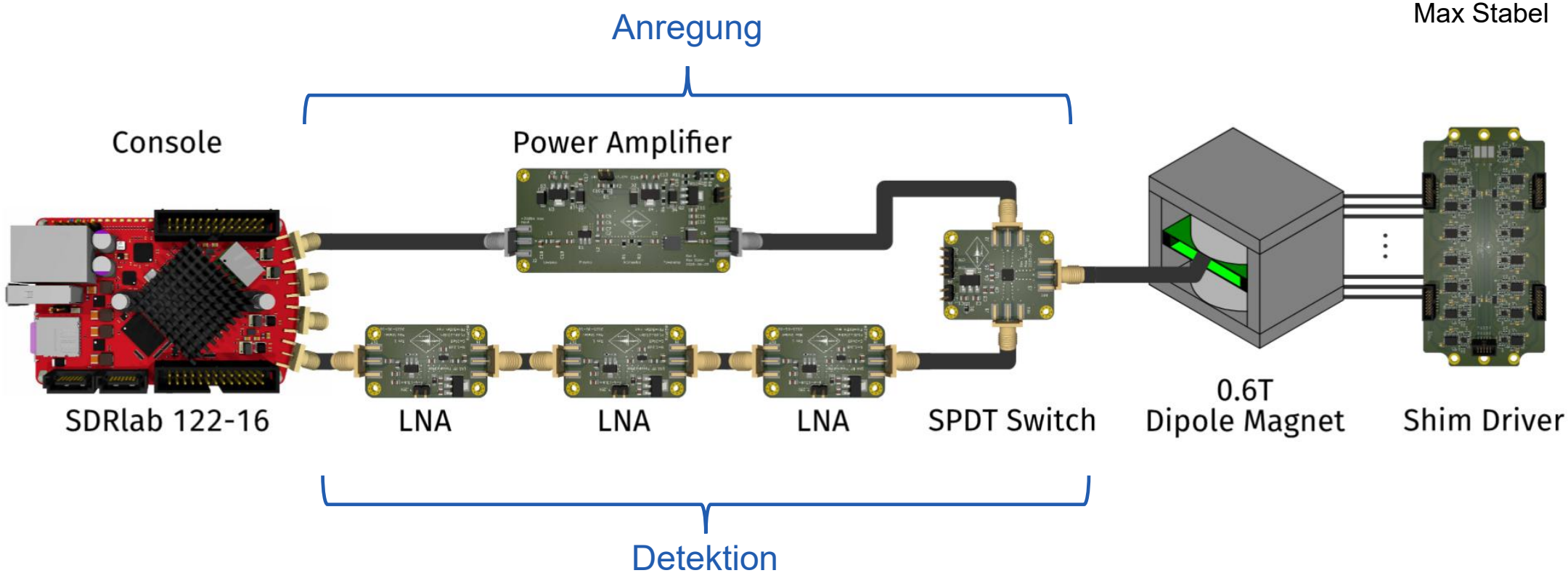




Elektronik-Aufbau



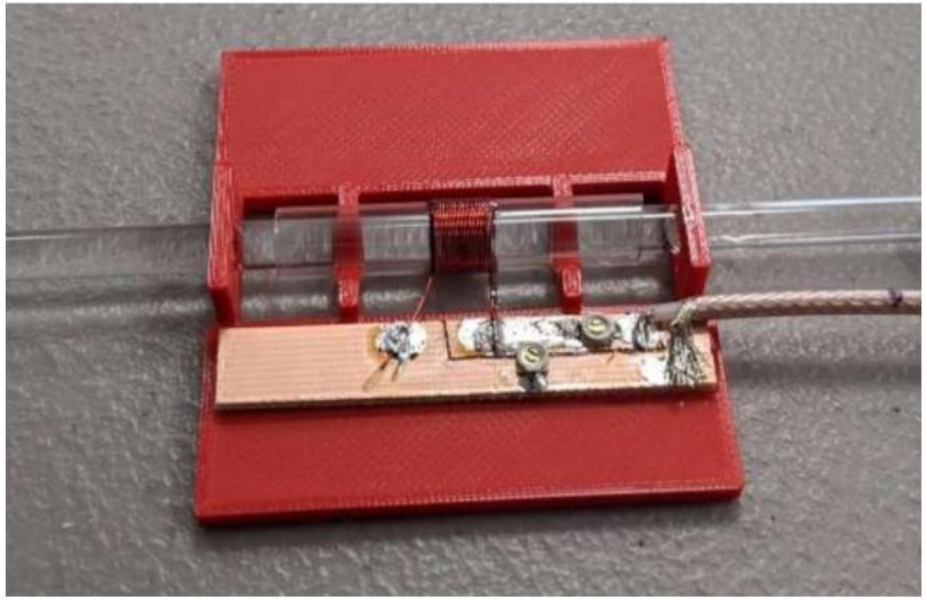
Max Stabel



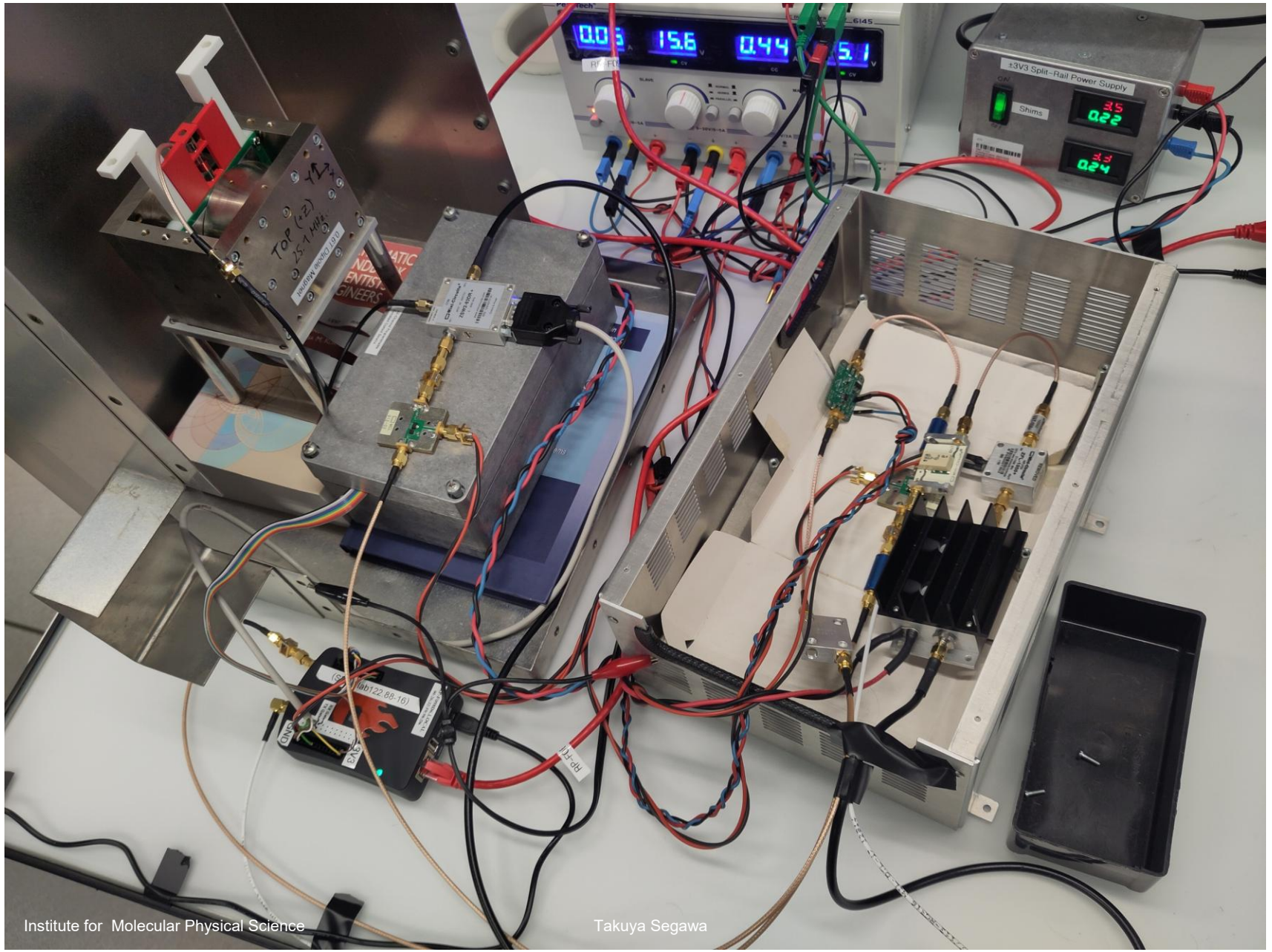
https://magnethical.org/

Der NMR-Probenkopf

- Von Andrew McDowell (NuevoMR)
  - Kupferspule, mit 18 Windungen
  - Tuning- und Matching-Kondensatoren



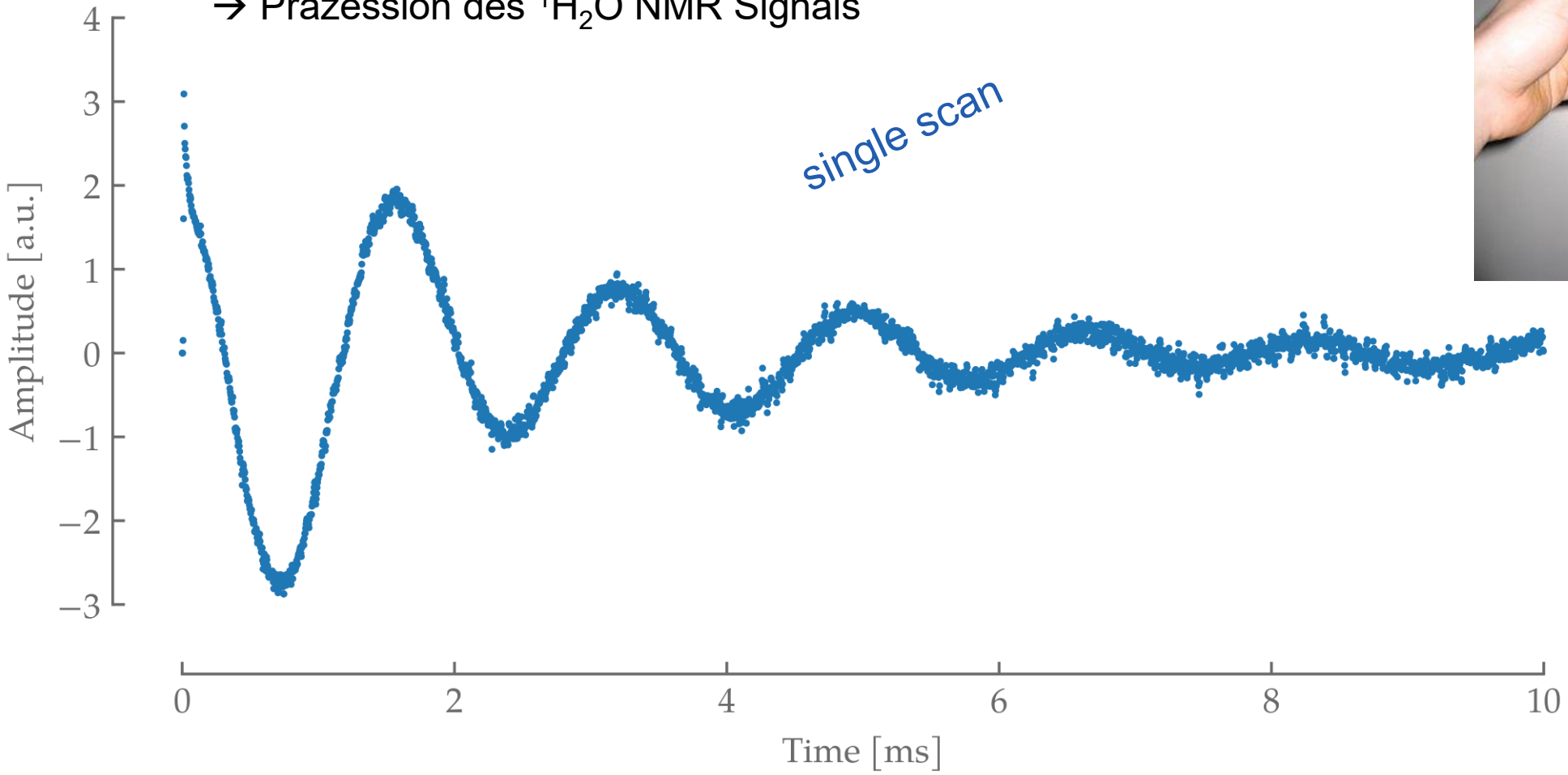
ETH zürich



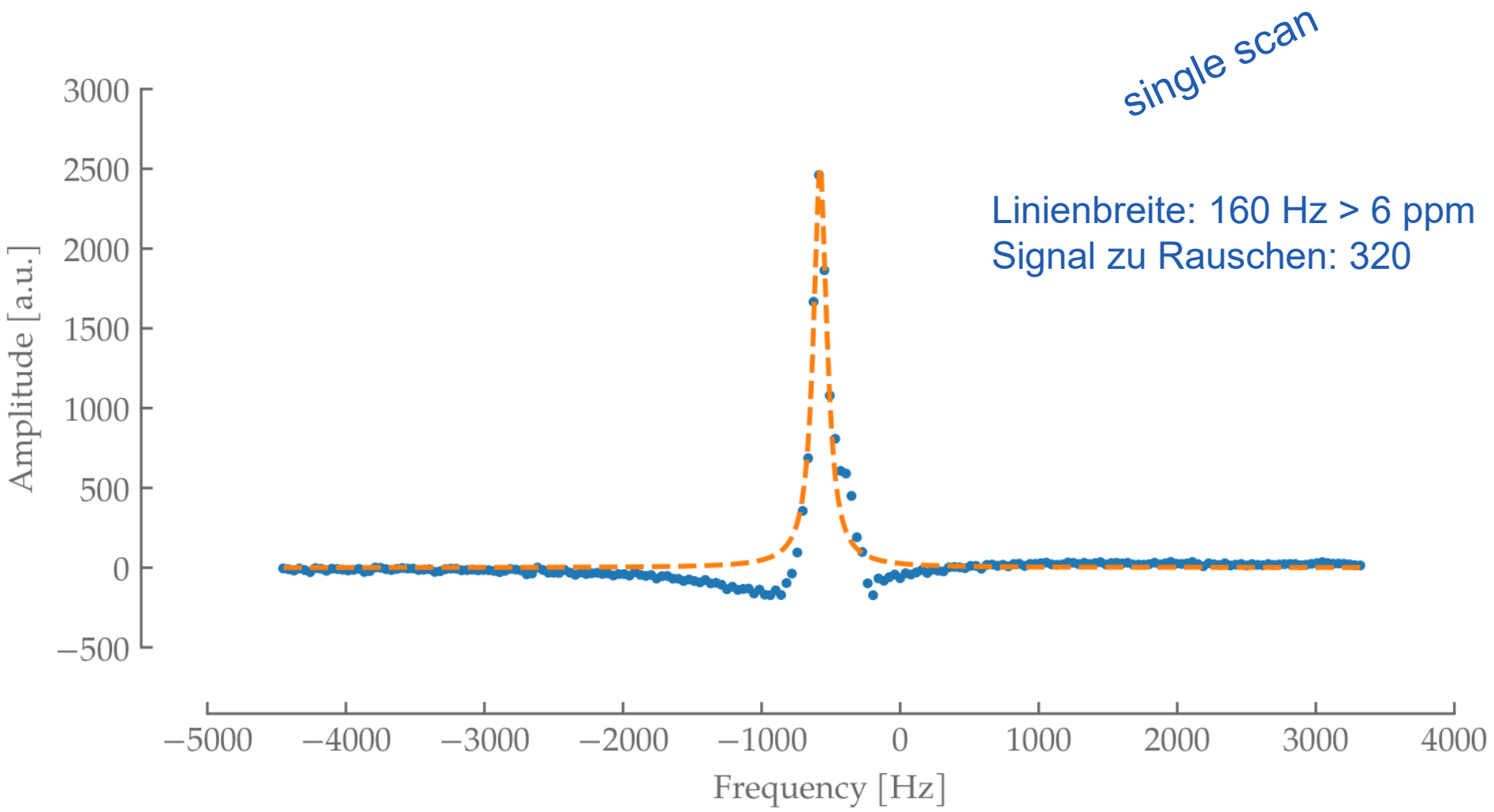
NMR Signal
FID (Freier Induktionszerfall) in einem 5 mm Röhrchen mit Wasser

→ Präzession des ^1H_2O NMR Signals



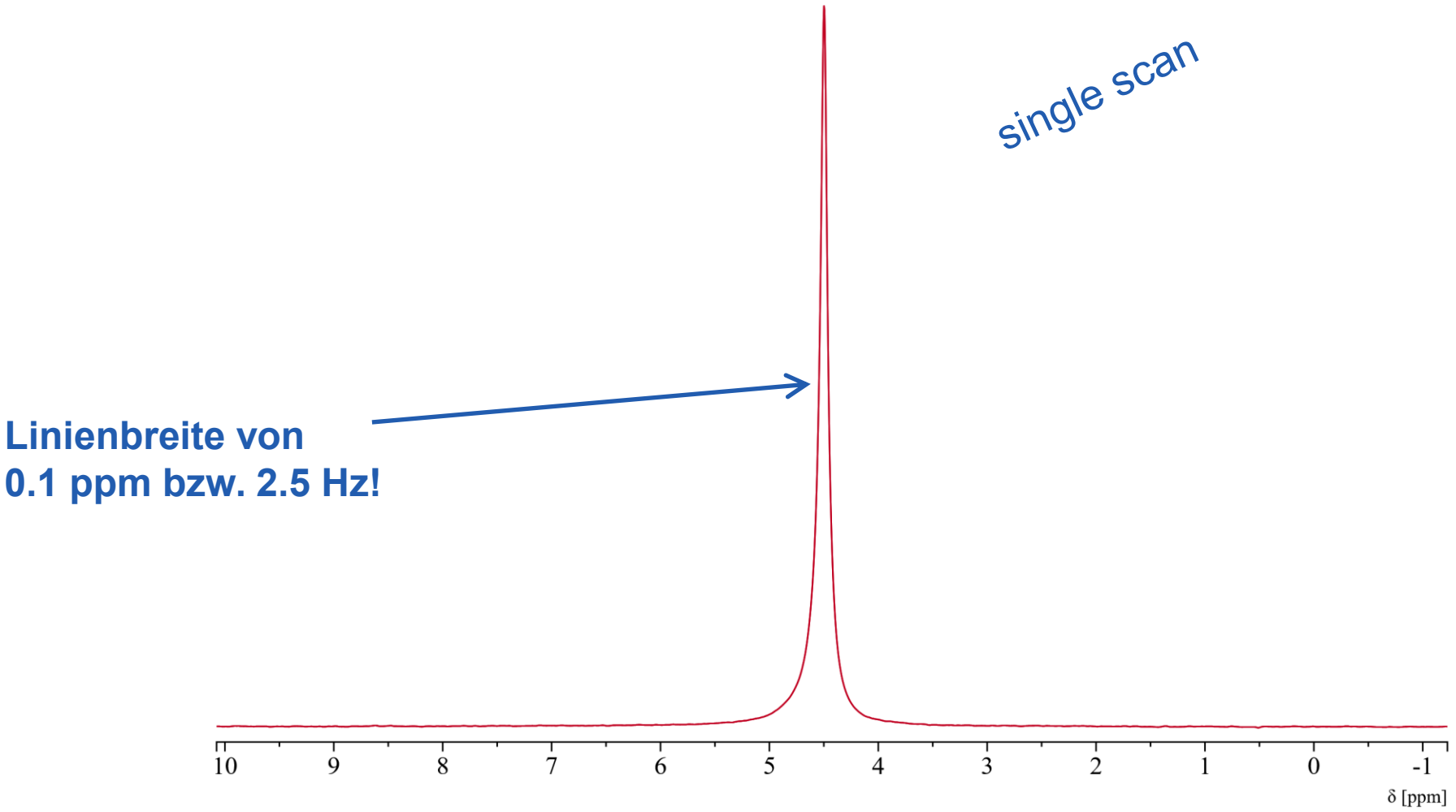


NMR Spektrum nach Fourier-Transformation
^{1}H NMR Spektrum in einem 5 mm Röhrchen mit Wasser



Für die höchste Homogenität müssen die Shim-Spulen angesteuert werden

^{1}H NMR Spektrum von einem 5 mm Röhrchen mit **Wasser**



^{1}H NMR Spektrum von einem 5 mm Röhrchen mit **Toluol (Toluen?)**

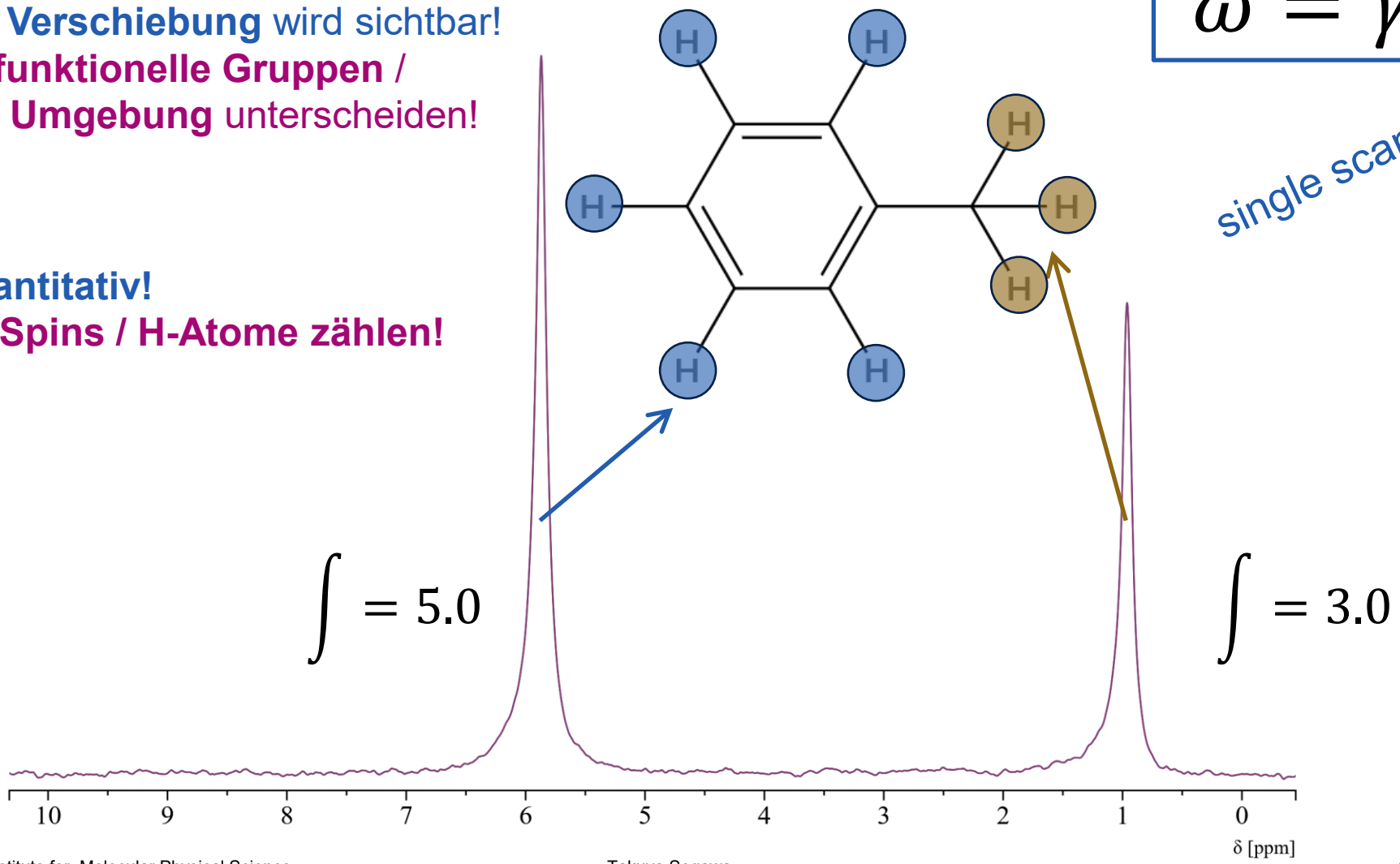
→ **Chemische Verschiebung** wird sichtbar!

1. **NMR** kann **funktionelle Gruppen / chemische Umgebung** unterscheiden!

→ **NMR ist quantitativ!**

2. **NMR kann Spins / H-Atome zählen!**

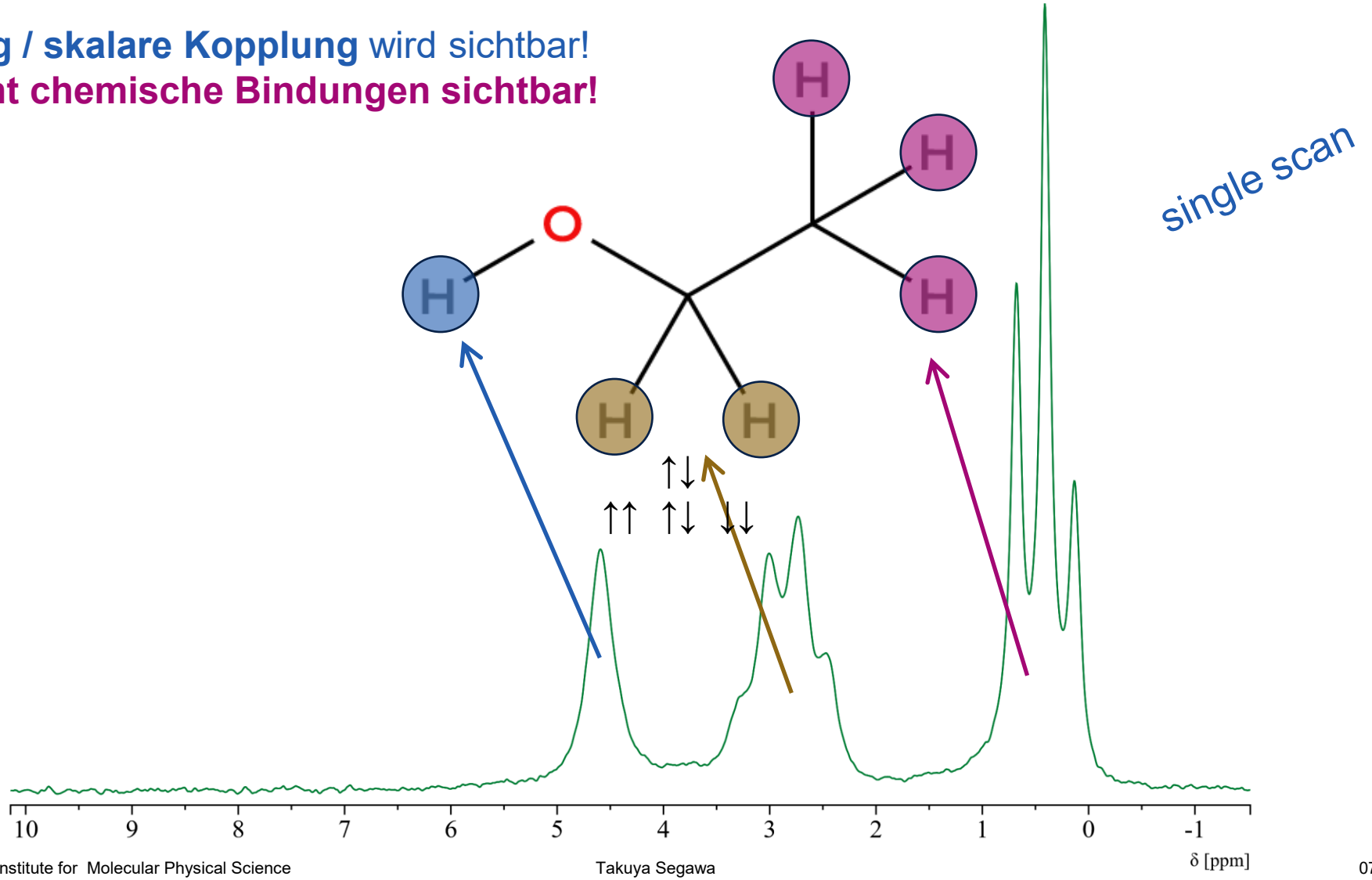
$$\omega = \gamma B$$



^{1}H NMR Spektrum von einem 5 mm Röhrchen mit **Ethanol**

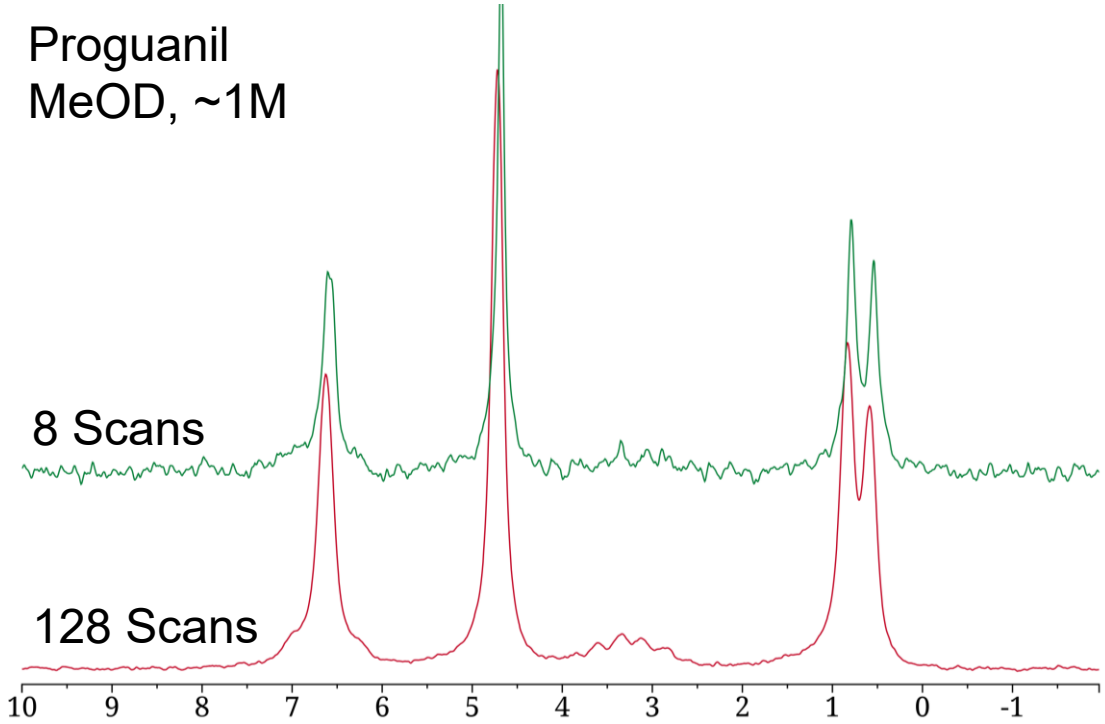
→ **J-Kopplung / skalare Kopplung** wird sichtbar!

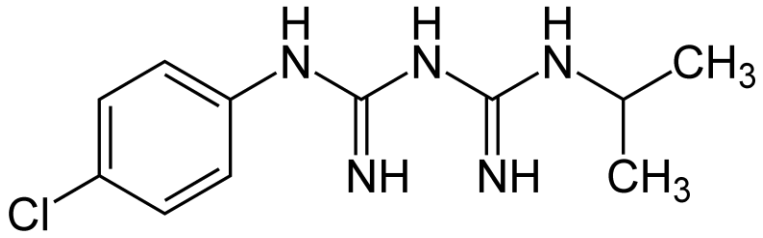
3. **NMR macht chemische Bindungen sichtbar!**



NMR von Malaria-Medikamenten

→ Akkumulation von vielen Spektren möglich



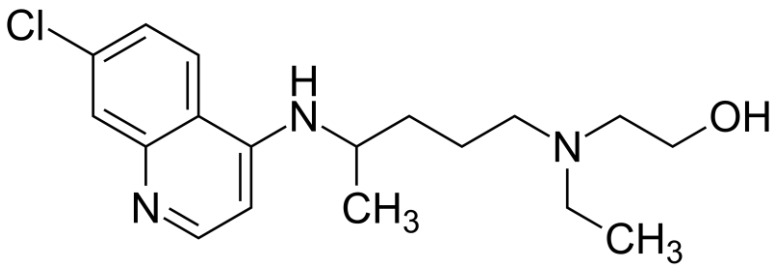


Proguanil



Cosmin Sinha
Semesterstudent

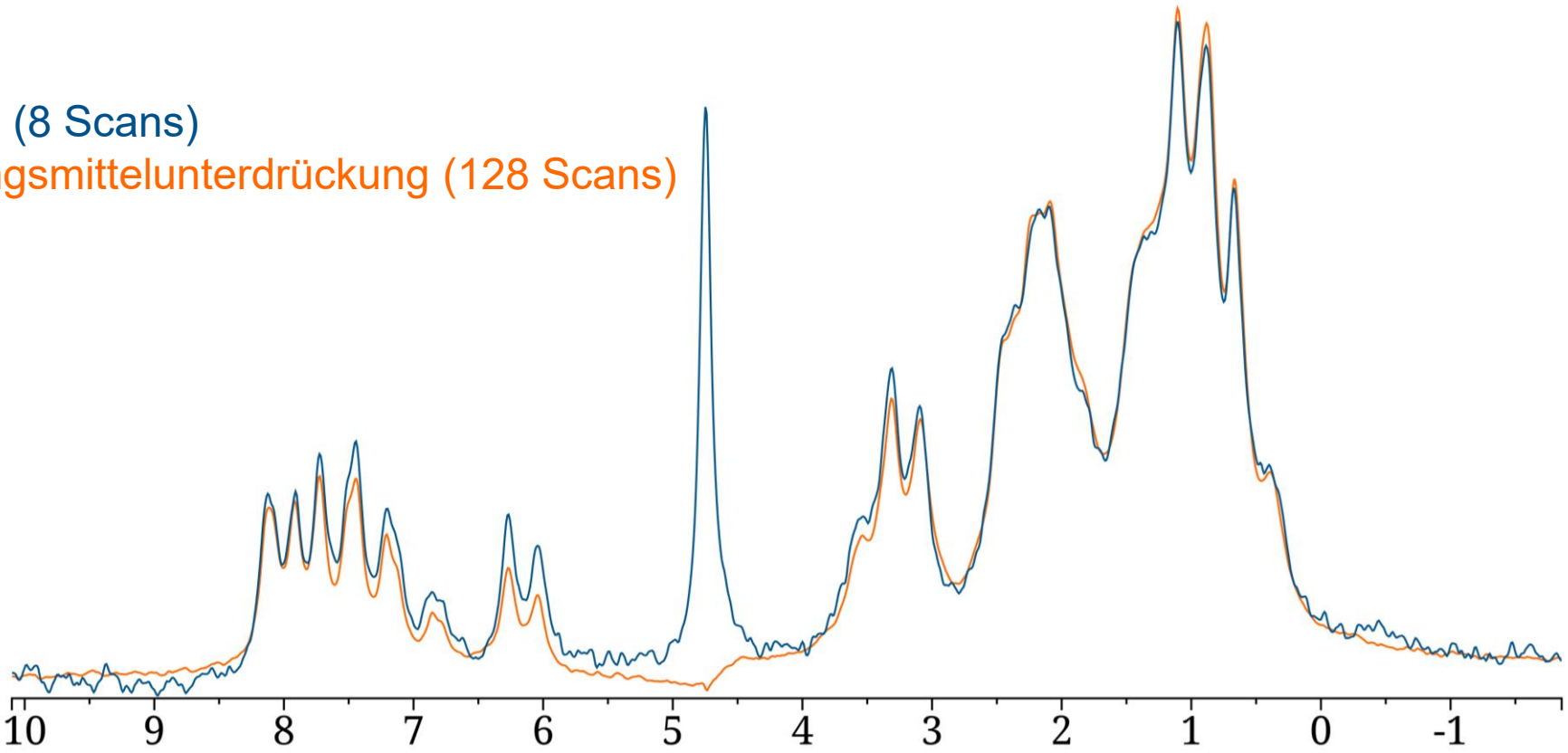
NMR von Malaria-Medikamenten



Hydroxchloroquin

→ Spektrale Unterdrückung des Lösungsmittelpeaks möglich

Hydroxchloroquine
MeOD, ~0.9M
Normales Spektrum (8 Scans)
Spektrum mit Lösungsmittelunterdrückung (128 Scans)



Warum magnETHical am Gymnasium?

Warum *nicht* ein magnETHical am Gymnasium?

1. NMR wird erschwinglich
2. NMR Spektrometer ist “offen” (“keine Blackbox”)
3. Ein Chemie-Experiment, dass bisher noch nicht am Gymnasium gezeigt werden konnte
4. SuS können direkt am magnETHical messen (SPF, Maturarbeit, …)
5. NMR zeigt das ganze Moleküle (IR “nur” die funktionellen Gruppen, MS “nur” die Fragmente)
6. Nicht nur Chemie, auch interessant für Physik, Engineering (Maturitätsreform)
7. Ziel: Aufbau einer Community, teilen von Experimenten, Lehrmaterial
8. Mit NMR kann man in die Quantenwelt der Spins direkt reinsehen
9. NMR ist eine nicht destruktive Methode: Sample kann wiederverwendet werden
10. NMR ist cool!

Die ersten vier Abnehmer eines *magnETHical 25* Spektrometers

- Kantonsschule Rotkreuz, ZG
- Kantonsschule Zürich Nord, ZH
- Kantonsschule Limmattal, ZH

- VSN: Lieferung Mitte 2027

→ Ausleihe des Spektrometers durch das Berzelius-Projekt (Metrohm) möglich

Schul-Experiment I:
Ethanol Volumenkonzentration bestimmen in einem Hustensirup

Enthält 6% Vol. Alkohol.

Nicht für Kinder und Jugendliche geeignet.



ETH zürich

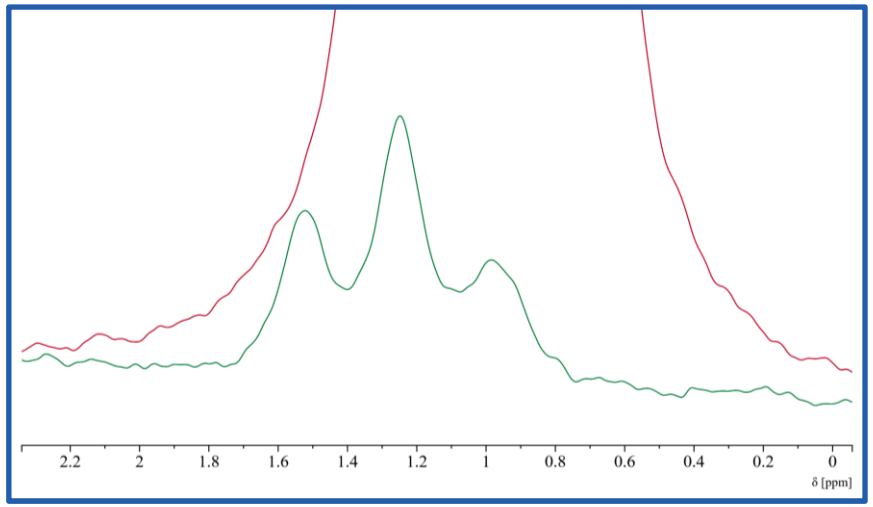
$$\frac{\int CH_3\ (\text{Neocitran})}{\int CH_3\ (\text{Ethanol})} \approx 0.07$$

Reiner Neocitran Hustensirup

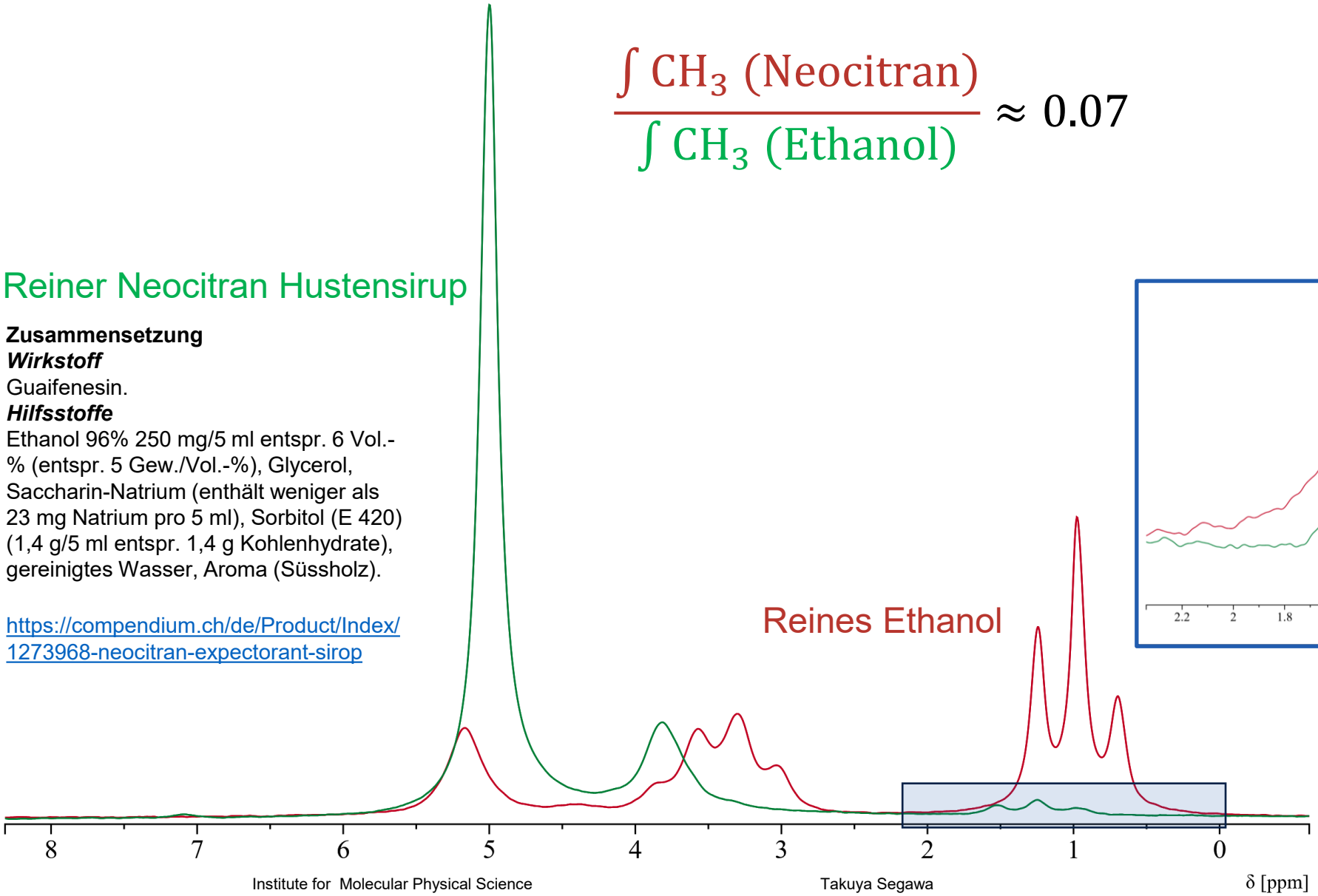
Zusammensetzung
Wirkstoff
Guaifenesin.
Hilfsstoffe
Ethanol 96% 250 mg/5 ml entspr. 6 Vol.-% (entspr. 5 Gew./Vol.-%), Glycerol, Saccharin-Natrium (enthält weniger als 23 mg Natrium pro 5 ml), Sorbitol (E 420) (1,4 g/5 ml entspr. 1,4 g Kohlenhydrate), gereinigtes Wasser, Aroma (Süssholz).

https://compendium.ch/de/Product/Index/1273968-neocitran-expectorant-sirop

Zoom



Reines Ethanol



Schul-Experiment II:
Maturarbeit “Rapsöl-Biodiesel-Synthese”

Jonathan Grob, Januar 2026
Kantonsschule Küsnacht (ZH)
Betreuung: Yvonne Hari

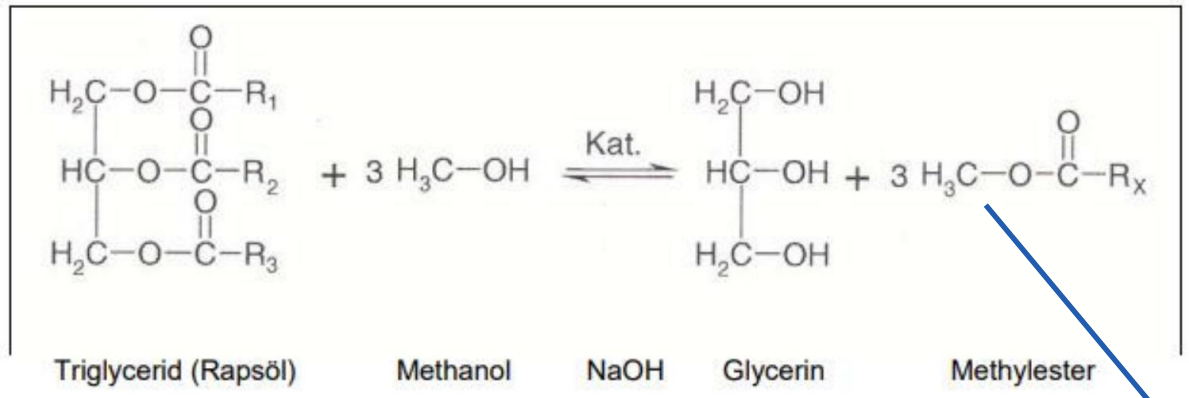


Abbildung 1 Gleichgewichtsreaktion der Umesterung von Rapsöl
Quelle: Schulbiologiezentrum Hannover, 2012, S. 8, aus «Vom Raps zum Biodiesel: Vom Acker in den Tank?», PDF-Dokument

Methoxy-Protonen des Methylesters

NMR-Take-Home-Message für SuS

1. NMR kann funktionelle Gruppen sehen
2. NMR kann chemische Bindungen sehen
3. NMR ist quantitativ: NMR kann Spins, H-Atome und Moleküle zählen

NMR ist cool! ☺

Danksagung

ETH Zürich:

- Josef Agner
- Riccardo Cadalbert
- Alexander Däpp
- Prof. Matthias Ernst
- Tiago Ferreira das Neves
- Ronny Gunzenhauser
- Lukas Heiniger (heute: Lonza)
- Dr. Albannay Mohammed (heute: Quad Systems)
- Oliver Oberhänsli
- Marco Rohr
- Cosmin Sinha
- Félix Torres (heute NexMR / Magritek)

MaRCoS:

- Dr. Vlad Negnevitsky (Oxford Ionics, GB)
- Prof. Joseba Alonso (MRILab, CSIC and Universitat Politècnica de València, Spanien)

SABR Enterprises, LLC., Boston, USA

- Robert Mercurio
- Robert Lown

NuevoMR, LLC., Albuquerque, USA

- Dr. Andrew McDowell

NMRium / Zakodium Sàrl:

- Dr. Luc Patiny

VSN-Shop:

- Dr. Hansruedi Dütsch

Finanzierung: