

NMR ノート

引地 邦男 著

序

今日、NMR は構造解析、物性解析の手段としてなくてはならないものになっている。複雑な蛋白質の水溶液中での立体構造も NMR で決めることができるようになり、我が国においてもこの方面の研究が盛んに行われている。しかし、その解析技術、測定法はソフト、ハード両面において、欧米で開発された手法に依存しているのが現状である。我が国において独創的な新しい NMR 測定法、データ解析法が開発されれば、新しい分野の研究の進展が期待される。本書はそのために必要な NMR の基礎的な原理を、筆者が北海道大学に在職中に行った大学院の講義用に準備したノートをもとにしてまとめたものである。

この書はすでに NMR の初歩的な勉強を終え、実際に NMR の測定をしている人たちを対象にして書かれている。その意味で NMR の入門書ではない。本書中、多数の式が現れるが、ブラックボックスのままではなく、できるだけ計算をていねいにして、現象の内容を明らかにしようと努めた。自分で NMR の測定をした結果が、なぜそのようになるのか疑問にもつ人たちが考える際に役立てば幸いである。

産業技術総合研究所主任研究員津田栄博士には 2 次元、3 次元 NMR の測定法について討論してもらった。北海道大学 NMR 研究室の熊木康弘氏には文献調査と NMR 測定でお世話になった。図 7.6、図 10.8、図 11.4、図 11.6、図 12.6、図 12.11、図 16.25 は熊木氏の測定によるもので、感謝申し上げます。日本電子(株) NMR グループの諸氏には測定法について種々お教えいただいた。図 17.6 は JEOL のパルス系列である。ご協力を感謝いたします。

平成 15 年 10 月

著者

目次

第1章 序論.....	1
1.1 核磁気モーメントの発見.....	1
1.2 NMR の発見と分子運動.....	2
1.3 高分解能 NMR の登場と分子構造解析.....	3
1.4 超伝導磁石と FT-NMR の登場.....	4
1.5 2次元 NMR.....	5
1.6 NMR イメージング.....	6
1.7 固体 NMR.....	6
1.8 その他.....	7
第2章 角運動量と磁気モーメント.....	14
2.1 角運動量とスピン.....	14
2.2 磁気モーメントと磁化.....	19
2.3 スピン演算子の行列表示といくつかの有用な公式.....	21
第3章 スピンの運動.....	22
3.1 古典論.....	22
3.2 回転座標系.....	26
3.3 断熱通過.....	31
3.4 量子力学による取扱い.....	33
3.5 遷移確率.....	37
第4章 密度行列入門.....	40
4.1 密度行列の時間変化.....	40
4.2 平衡磁化.....	44
4.3 FID 信号.....	46
4.4 直積演算子.....	48

第5章 相互作用	55
5.1 双極子 双極子相互作用.....	55
5.2 核四重極相互作用.....	60
5.3 四重極相互作用によるゼーマンエネルギーの分裂.....	63
第6章 相互作用	66
6.1 核と電子の磁気的な相互作用.....	66
6.2 化学シフト.....	67
6.3 J 結合.....	74
第7章 スペクトル解析.....	78
7.1 記号.....	78
7.2 基本的な事柄.....	79
7.3 AB 2 スピン系.....	80
7.4 AMX 3 スピン系.....	84
7.5 ABX 3 スピン系.....	85
7.6 等価なスピン群.....	89
7.7 摂動法.....	92
第8章 磁気緩和	94
8.1 プロット方程式と CW-NMR.....	94
8.2 緩和の理論.....	98
8.3 主導方程式.....	100
8.4 演算子形式の主導方程式.....	103
第9章 磁気緩和	106
9.1 双極子 双極子相互作用による緩和.....	106
9.2 四重極緩和.....	124
9.3 化学シフト異方性による緩和.....	127
9.4 スカラー緩和.....	130
9.5 スピン回転緩和.....	134
9.6 スピン結合した系の緩和.....	134

9.7	干渉効果.....	135
9.8	回転系の緩和.....	139
第10章	パルスフーリエ変換 NMR.....	147
10.1	衝撃応答関数とフーリエ変換.....	147
10.2	励起パルス.....	151
10.3	クアドラチュア検出 (quadrature detection QD)	155
10.4	離散的有限フーリエ変換.....	159
10.5	積算.....	163
10.6	アポダイゼーションとウィンドウ関数.....	167
10.7	ゼロフィル.....	169
10.8	感度.....	170
10.9	輻射減衰.....	172
第11章	二重共鳴.....	177
11.1	連続波による二重共鳴.....	177
11.2	デカップリングの実験法.....	187
11.3	双極子 双極子相互作用のある固体.....	189
11.4	広帯域デカップリング.....	191
11.5	広帯域デカップリングの Waugh 理論.....	196
第12章	多重パルス.....	206
12.1	エコー.....	206
12.2	横緩和時間の測定.....	214
12.3	併進拡散.....	216
12.4	縦緩和時間の測定.....	219
第13章	共鳴に及ぼす分子運動および化学交換の影響.....	223
13.1	運動による尖鋭化.....	223
13.2	試料回転による尖鋭化.....	227
13.3	化学交換が線形に及ぼす影響.....	231

第 14 章 磁化移動.....	235
14.1 磁化移動と INEPT.....	235
14.2 INEPT におけるデカップリングと多重線.....	240
14.3 DEPT.....	244
14.4 J 交差分極.....	247
第 15 章 2次元NMR I ^1H	254
15.1 J -分解 2次元 NMR.....	254
15.2 COSY.....	262
15.3 交差緩和相関 2次元 NMR.....	301
15.4 コヒーレンス移動経路選択 位相回しと磁場勾配パルス.....	315
第 16 章 2次元NMR ^{13}C 、 ^{15}N	331
16.1 ^1H - ^{13}C の J -分解 2次元NMR.....	331
16.2 ^1H - ^{13}C 化学シフト相関 2次元NMR.....	333
16.3 ^1H - ^{13}C 化学シフト相関 2次元NMRの ^1H 検出.....	345
16.4 Xフィルター、X半フィルター 2次元 NMR.....	363
16.5 ^{13}C - ^{13}C 化学シフト相関 2次元NMR INADEQUATE.....	370
第 17 章 3次元、4次元 NMR とその他.....	379
17.1 3次元 NMR.....	379
17.2 4次元 NMR.....	401
17.3 TROSY.....	402
17.4 2次元 NMR の磁場勾配パルスを利用した 1次元版.....	404
17.5 選択励起、選択非励起.....	407
付録.....	416
A1 座標の回転 (座標変換) とベクトルの回転.....	416
A2 主な核の定数.....	420
索引.....	421