



# 核磁気共鳴法NMRの説明資料

<大阪ヘッドオフィス>

〒532-0011

大阪市淀川区西中島5丁目13番9号 新大阪  
MTビル1号館2F

TEL:06-6838-0505 FAX:06-6838-0515

E-mail : office@unius-pa.com

*Kouichi KAJISAKI*

*UNIUS PAT. ATTORNEYS OFFICE*

*2016.4.21*



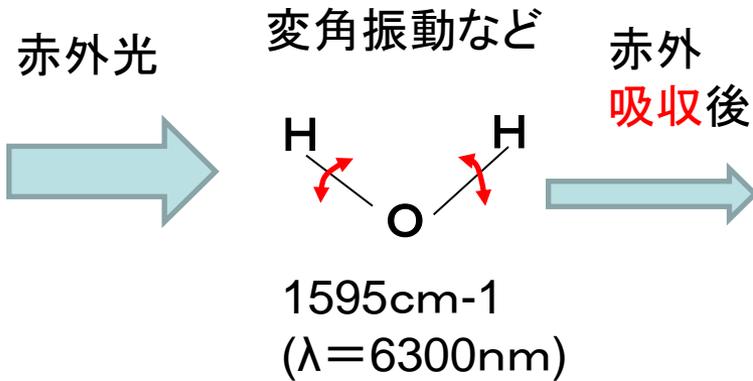
# NMRはなぜ難しい？

- ・NMR現象がイメージしにくい。
- ・操作自体が複雑。
- ・テキストに複雑な数式が多く出現する。
- ・解説を読んでも、分かりにくい。

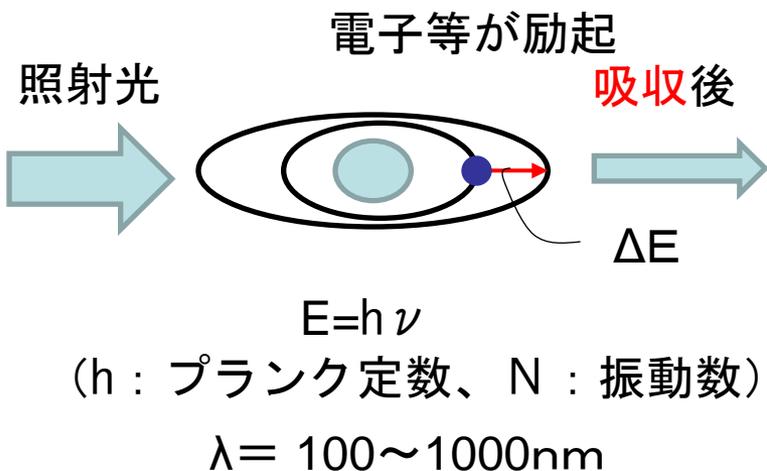


# 他の分光法

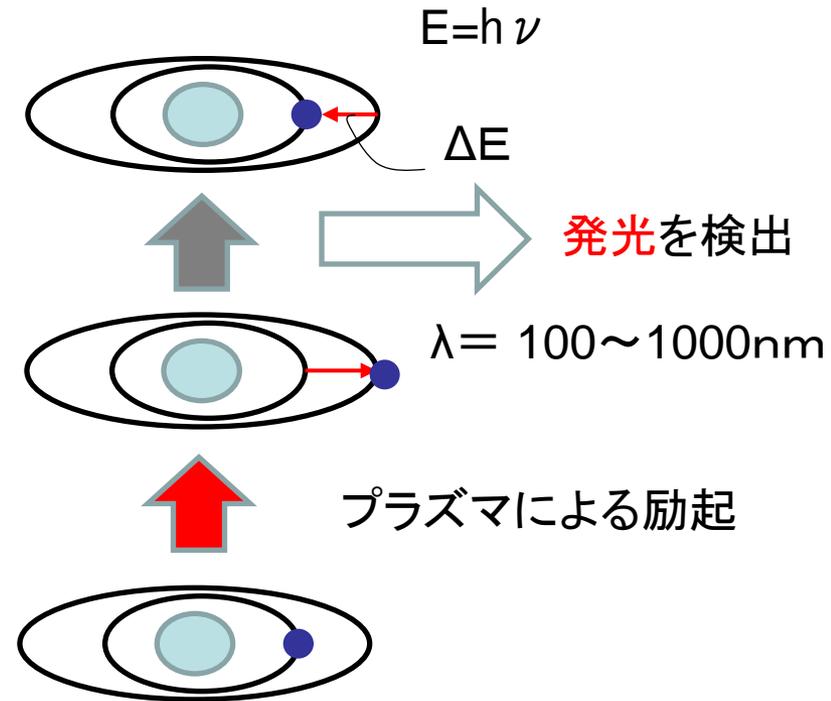
## 赤外分光法イメージ



## 吸光光度法イメージ



## プラズマ発光分光法 (IPC) イメージ





# NMRの場合

2.3~11.7 T  
=100~500MHz  
(<sup>1</sup>Hの共鳴周波数)

外部  
磁場

デカップル  
照射

磁場強度  
(20~70kHz)

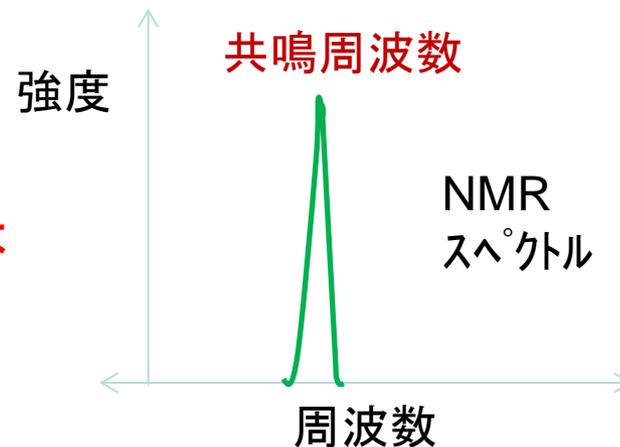
パルス  
照射

100~500MHz  
× 数μs

応答を検出

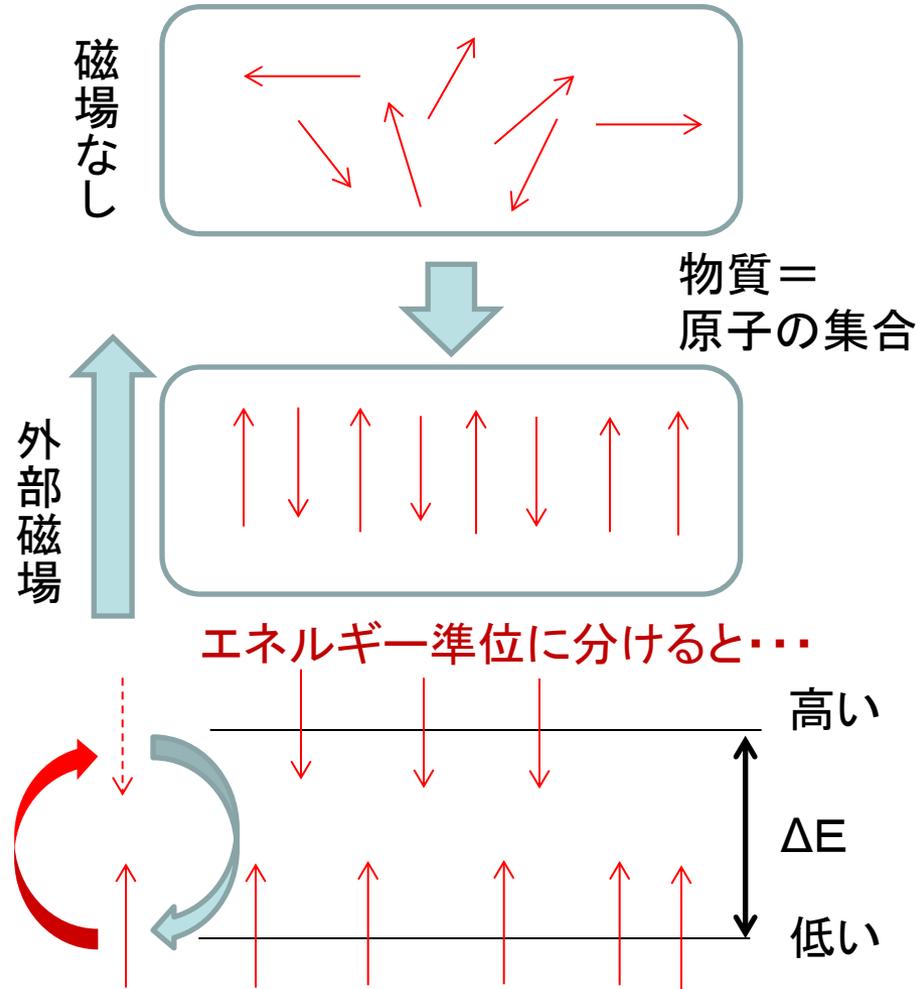
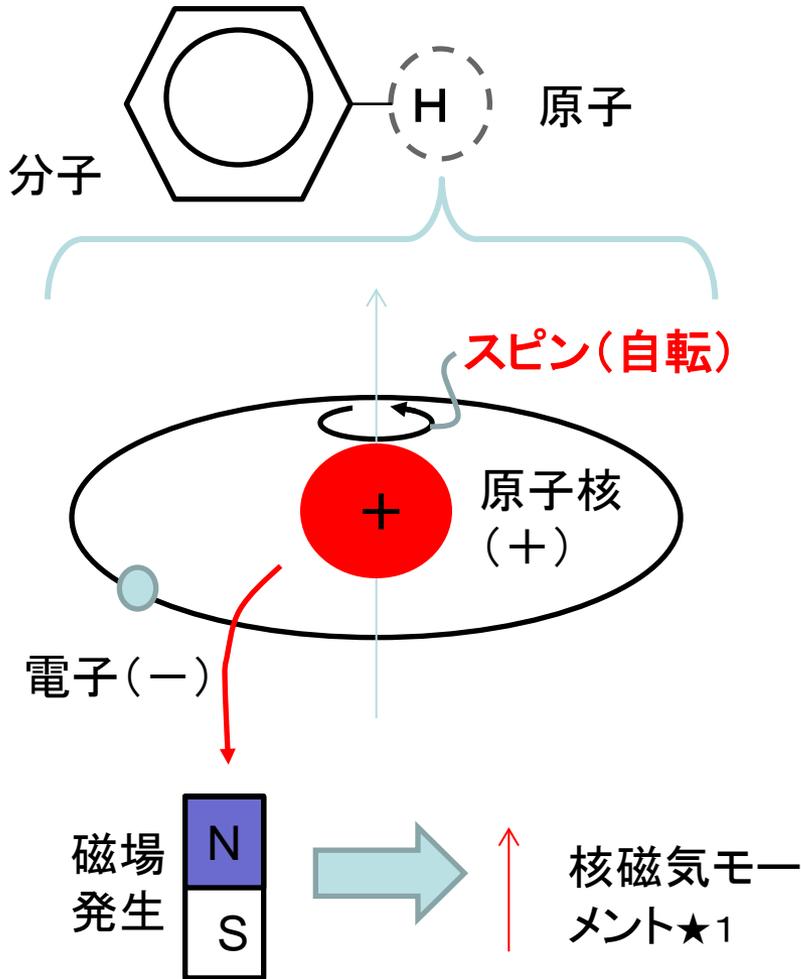
- ・NMR現象がイメージしにくい。
- ・操作自体が複雑。

しかし、結果は  
シンプル





# NMR: 核磁気共鳴



$\Delta E$ に相当する周波数の電磁波  $E=h\nu$  に対し、共鳴が生じる。UNIU P.A.O.

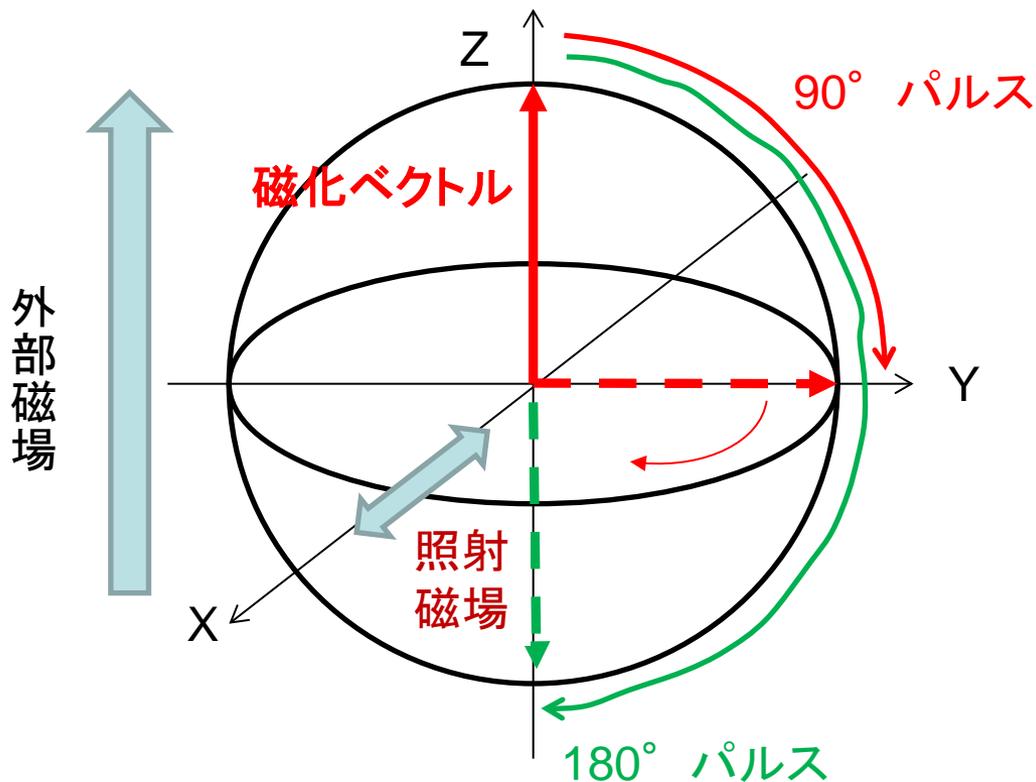
★1: 核の磁気方向と量を示すベクトル量





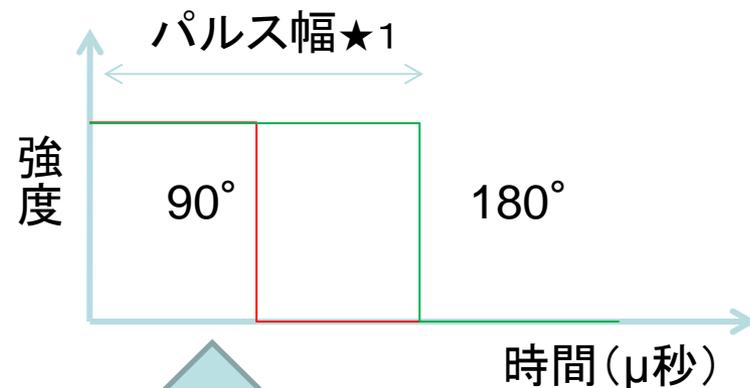
# 高周波パルス照射

・・・ある軸の回りに磁化ベクトルを倒す(回転)働き

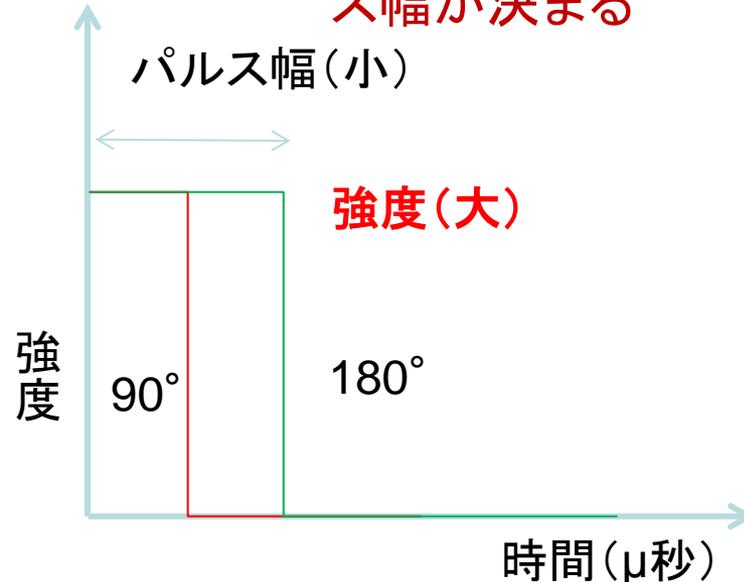


倒れた磁化ベクトルは共鳴周波数でZ軸回りに回転している

照射磁場は共鳴周波数の高周波磁場



磁場強度でパルス幅が決まる



★1:パルス(矩形波)の照射時間、1つのパルスには高周波成分が含まれる。

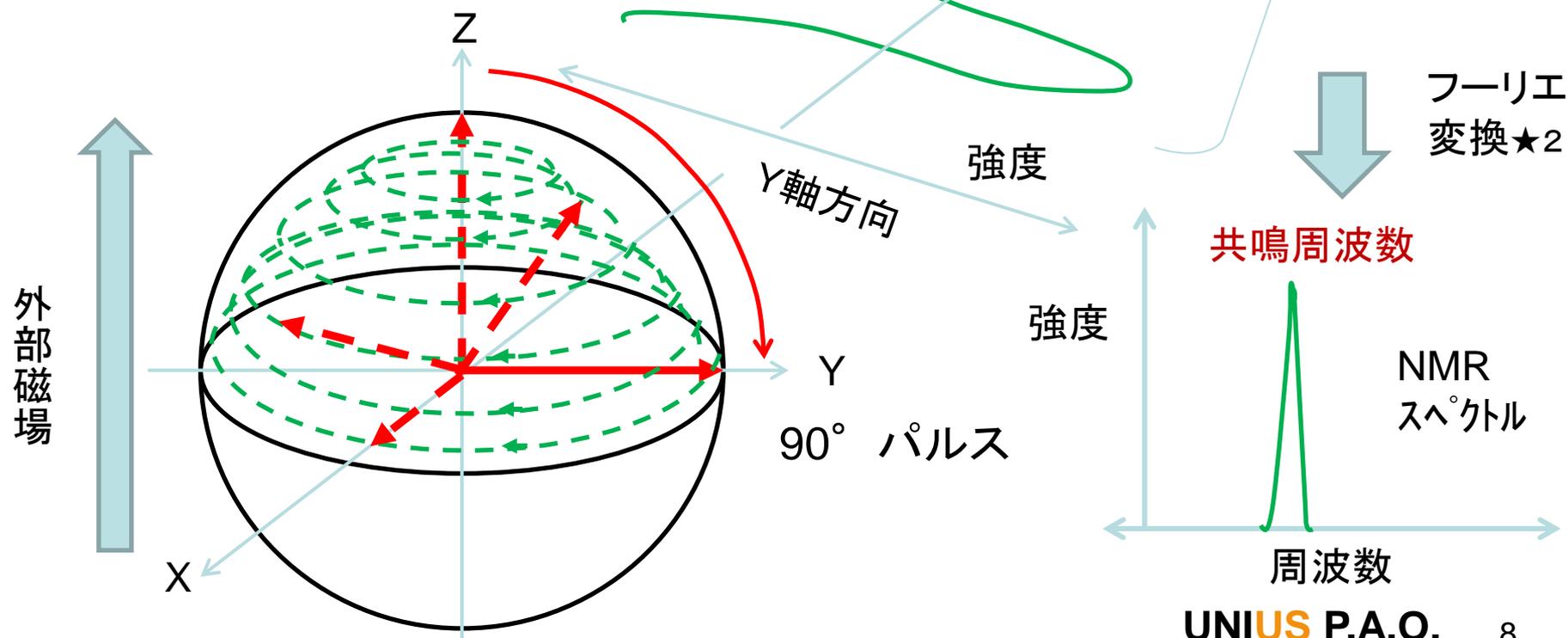


# スペクトルの測定

・・・Y軸方向の磁化ベクトルの強度変化を検出し、  
NMRスペクトルに変換する

90° パルス照射後・・・

共鳴周波数で回転しながら、  
元の磁化ベクトルにもどる(緩和)



★2: ある波形を正弦波のような性質の良くわかっている波形の重ねあわせに分解して表示する技術



# 化学シフト(有機物)

・・・検出される周波数が原子核の外部環境によってズれる現象

・電子密度の状態の違いなどによる

例えば・・・

電子密度が小→磁場を受けやすい→共鳴周波数は大

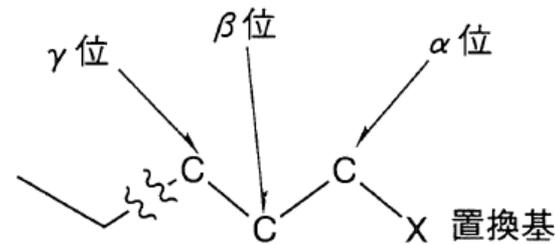
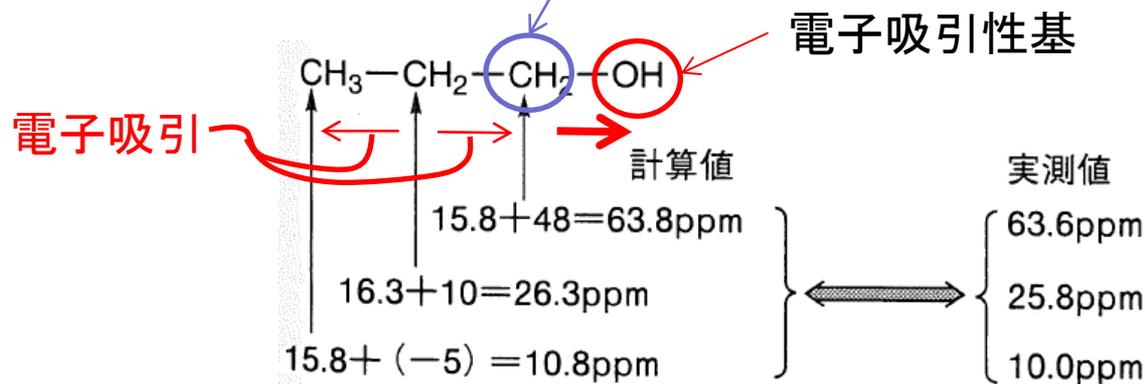


図 2-13 化学シフトの計算値と実測値

表 2-3 アルカンの末端の水素原子 R-H を置換基 X で置き換えたときの <sup>13</sup>C-NMR 化学シフトの変化

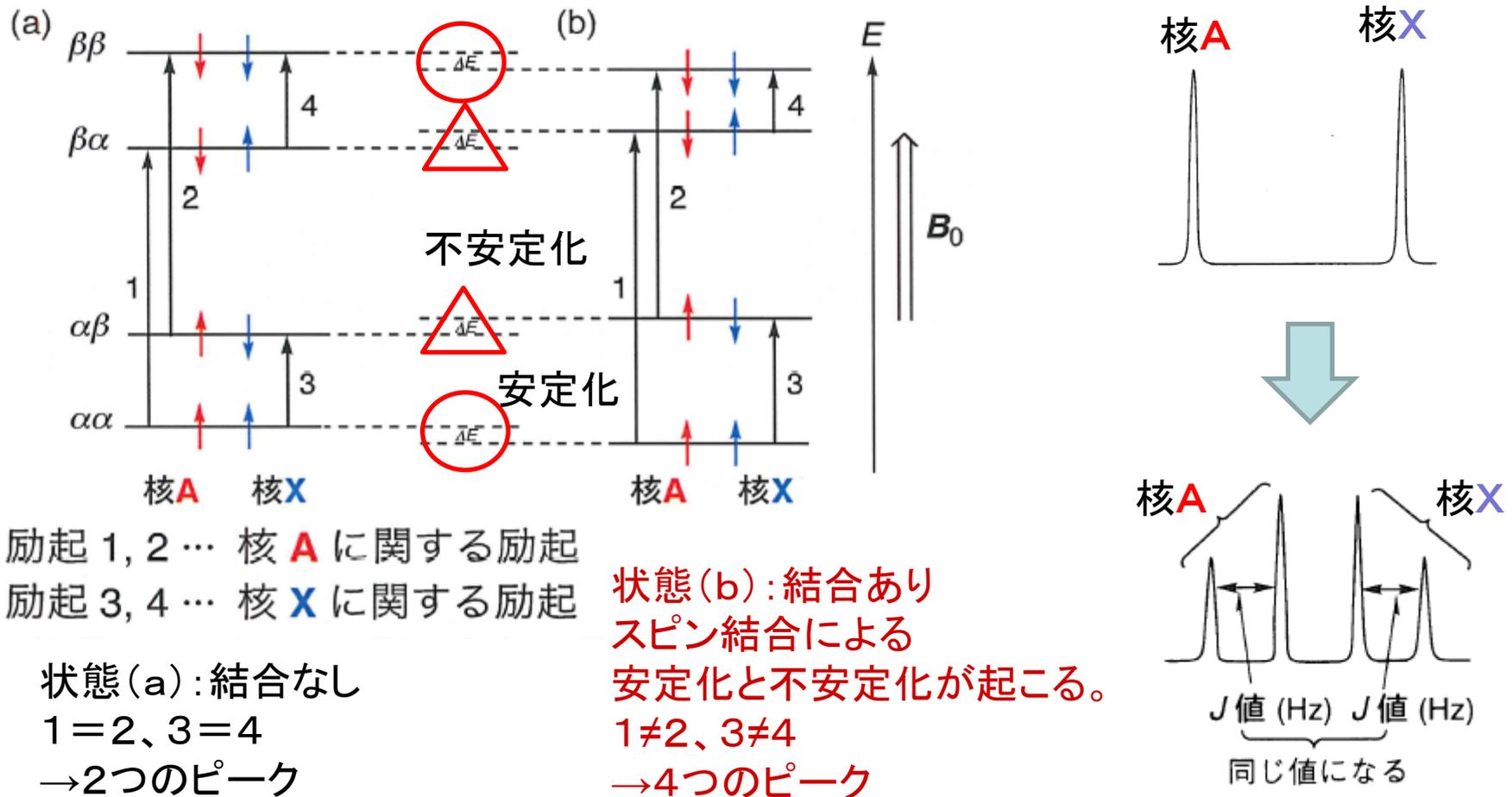
X	α位の炭素の化学シフトの増減値(ppm)	β位の炭素の化学シフトの増減値(ppm)	γ位の炭素の化学シフトの増減値(ppm)
OH	+48	+10	-5

ppmは共鳴周波数のシフト量



# スピンスピン結合(有機物)

・・・測定対象核の共鳴周波数が、近くの核の影響で相互に分裂する現象





# 化学シフト(無機物)

・・・検出される周波数が原子核の外部環境によってズれる現象

・電子密度の状態の違いなど  
→磁気遮蔽効果★1の相違など

例えば・・・**Borax: Na<sub>2</sub>B<sub>4</sub>O<sub>7</sub>·10H<sub>2</sub>O**

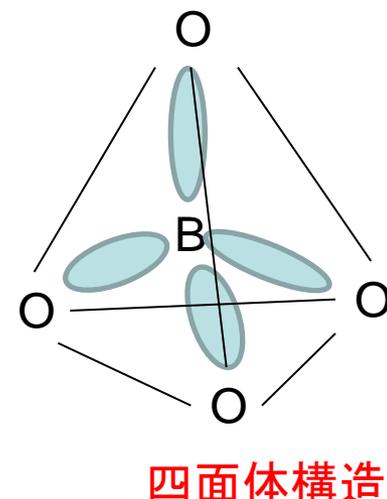
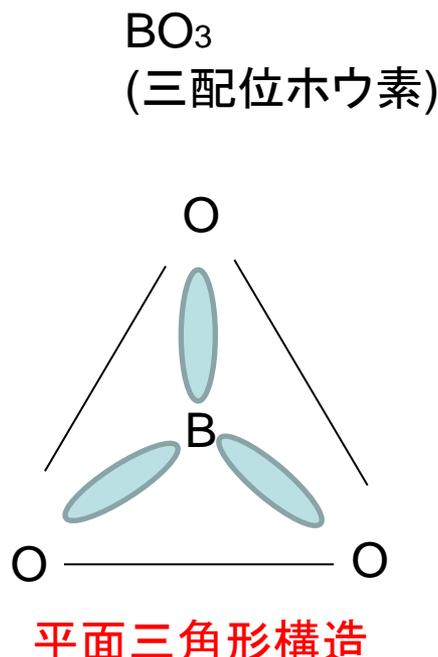
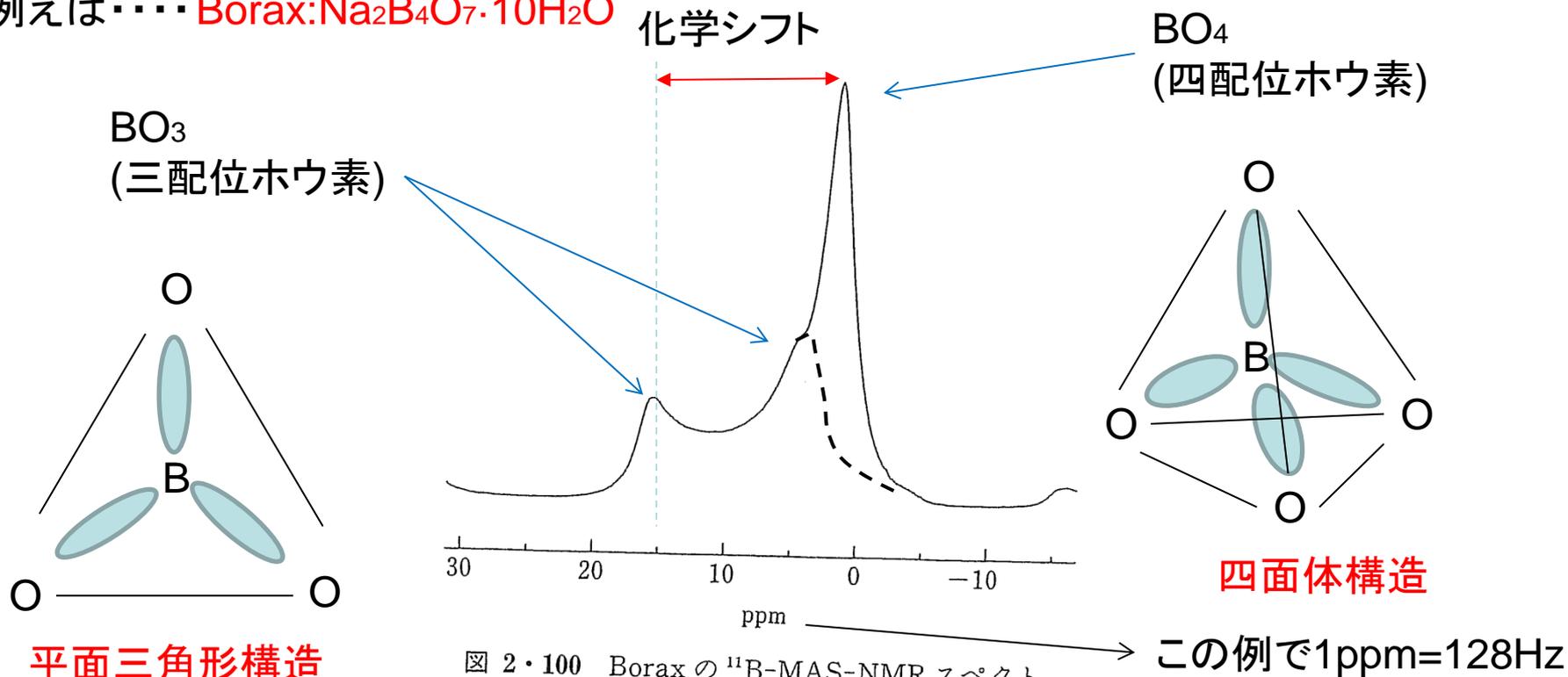


図 2・100 Borax の <sup>11</sup>B-MAS-NMR スペクトル (<sup>1</sup>H デカップル, 測定周波数 128.38 MHz, 回転数 4.04 kHz)

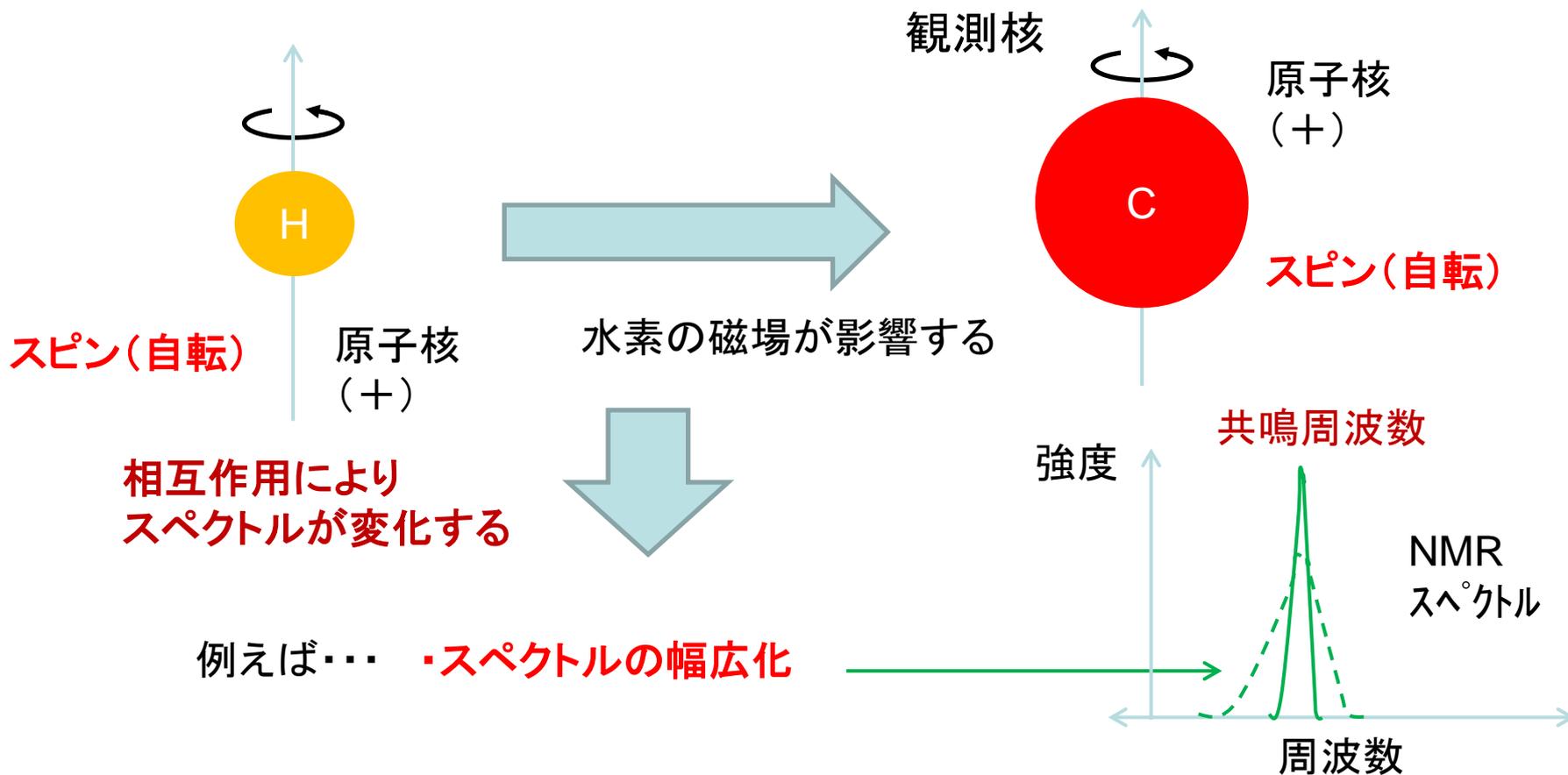
出典: 日本化学会編「実験化学講座5第4版」240頁

★1: 原子核に対して電子雲が外部磁気を弱める効果



# 双極子カップリング

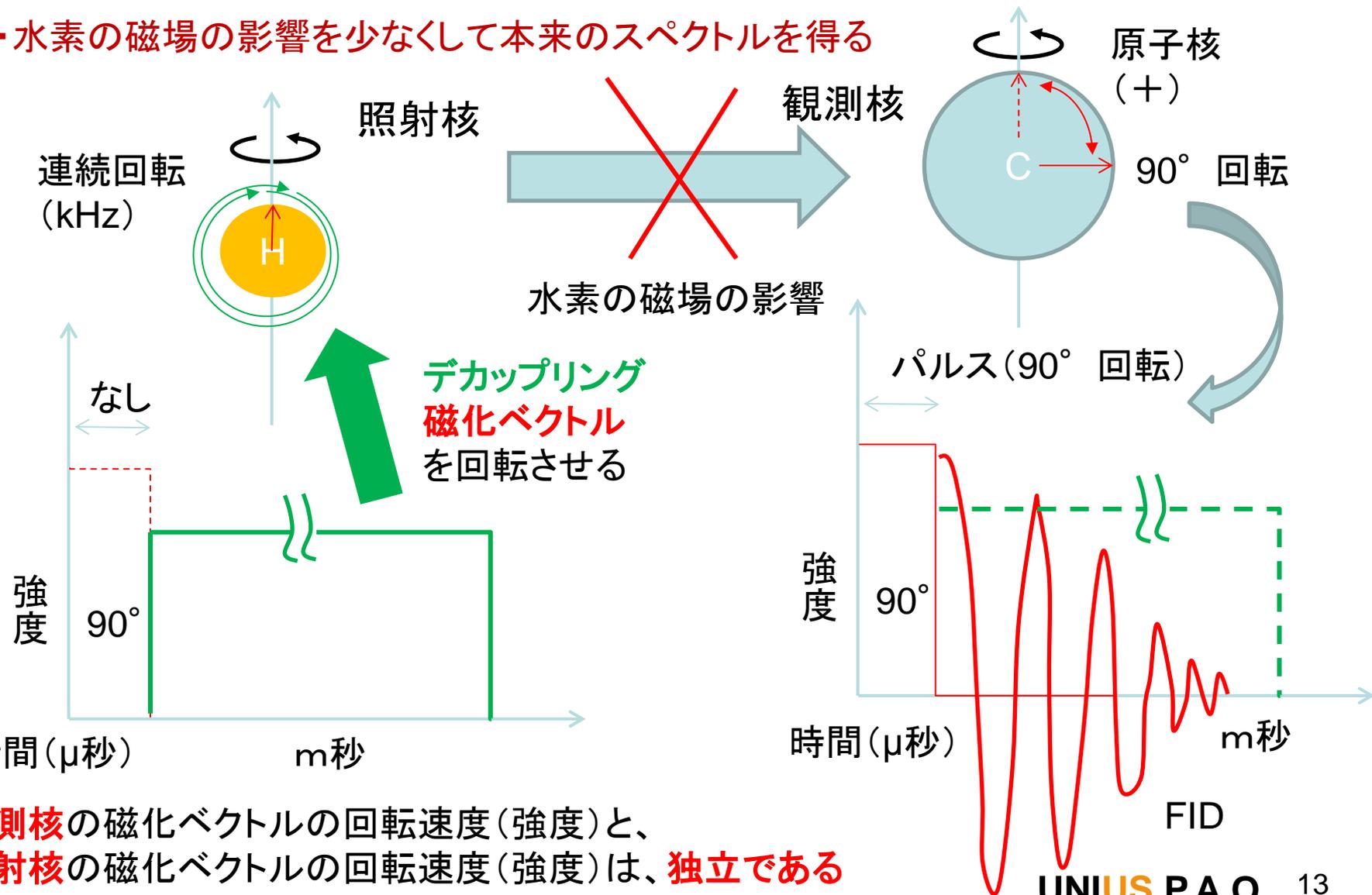
近隣する原子





# デカップリング

・・・水素の磁場の影響を少なくして本来のスペクトルを得る

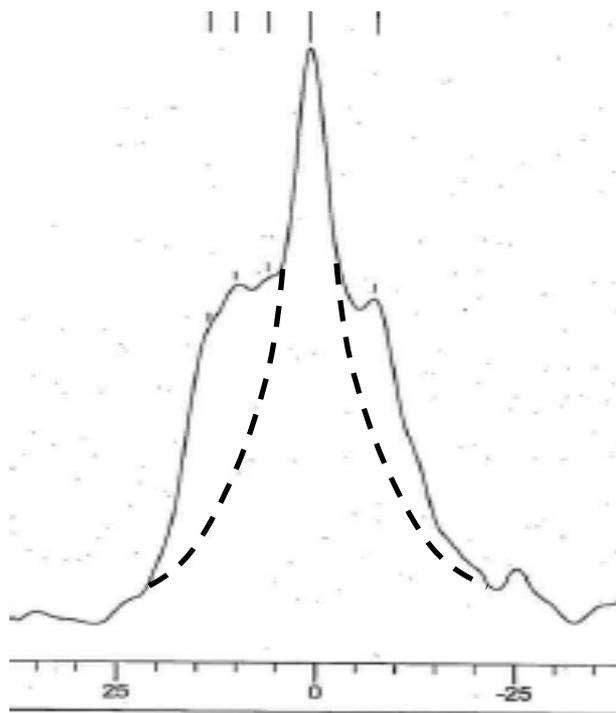


**観測核**の磁化ベクトルの回転速度(強度)と、**照射核**の磁化ベクトルの回転速度(強度)は、**独立である**



# デカップリング強度の違い

## NMRチャート



強度大きい

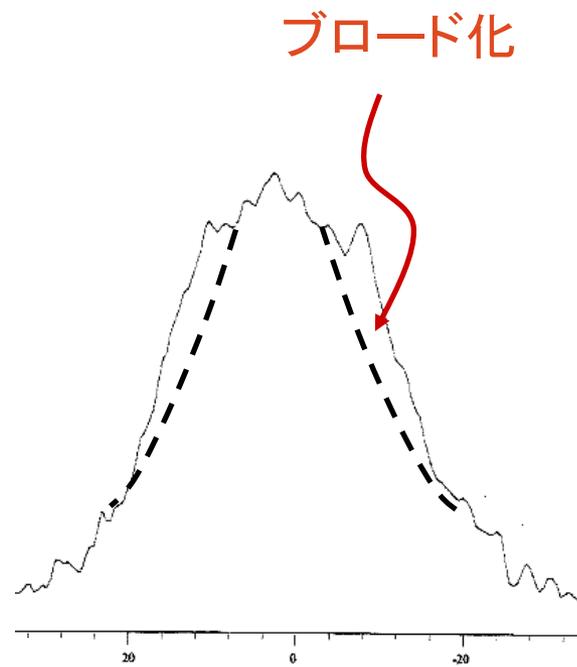
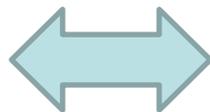
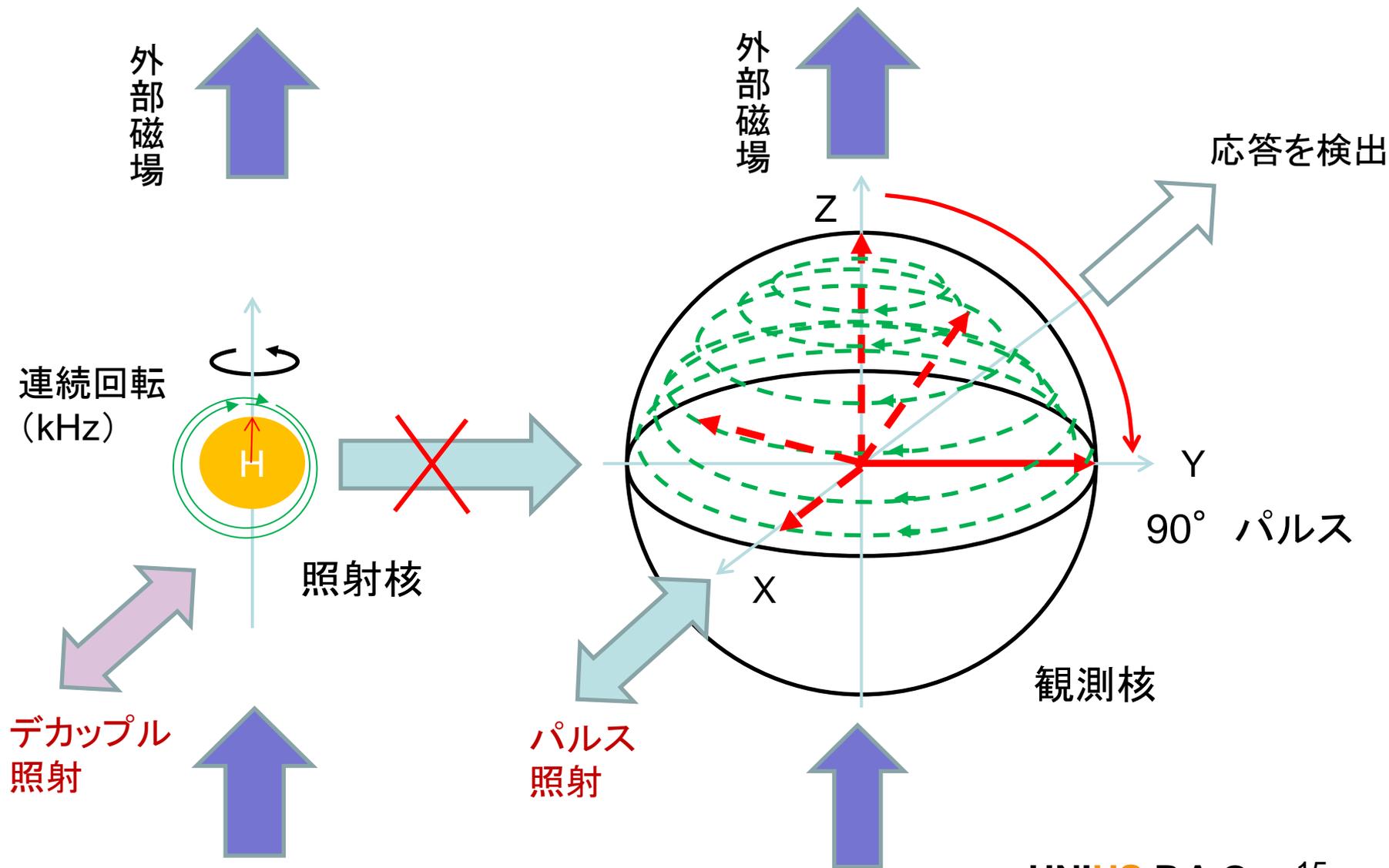


図1 KSG1の<sup>13</sup>B NMR スペクトル  
強度小さい



# まとめ (NMRのイメージ)





おわりに

ご静聴ありがとうございました。