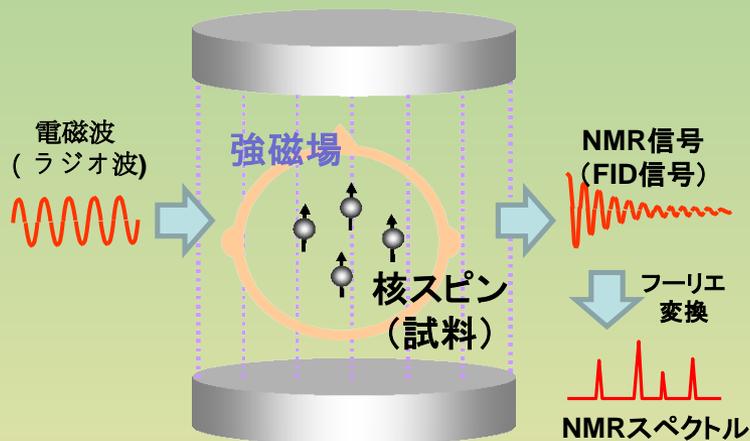


核磁気共鳴分光法 NMR

Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy

測定原理：NMRは、原子核が持つ核スピンの磁場中でラジオ波と共鳴する現象を観測する装置です（図1）。核スピンを持つ原子核である水素原子核 ^1H や炭素原子核 ^{13}C の他、 ^{31}P 、 ^{19}F 、 ^{29}Si など、ほぼ全ての元素が観測対象となります。近年のNMR装置はパルス-フーリエ変換型であり、ラジオ波パルスを吸収した試料が放出するラジオ波をFID（Free Induction Decay：自由誘導減衰）信号として検出し、フーリエ変換することで核磁気共鳴スペクトルを得ることができます。核スピンは化学構造に応じた磁気的環境の違いによって異なる周波数で共鳴するため、得られるスペクトルから化学構造情報を得ることができ、分子構造の決定などに利用されます。溶液試料を測定対象とするのが一般的ですが、固体試料を直接観測する方法もあり、材料の化学構造や物性評価などにも用いられます。

応用例：図2にシリカゲルの ^{29}Si 固体NMRスペクトルの例を示します。定量的な測定の結果により、第2近接ケイ素の配置によって異なるケイ素サイトが3種（Q2, Q3, Q4）存在し、それらの面積比からQ4の存在率が最も高いことがわかります。



磁場中の核スピンはラジオ波パルスを受けると、それぞれの核スピンの共鳴周波数に相当する電磁波を吸収します。次に吸収したラジオ波をFID信号として放出します。FID信号を検出し、フーリエ変換したものが、NMRスペクトルとなります。

図1 NMR分光分析の概略

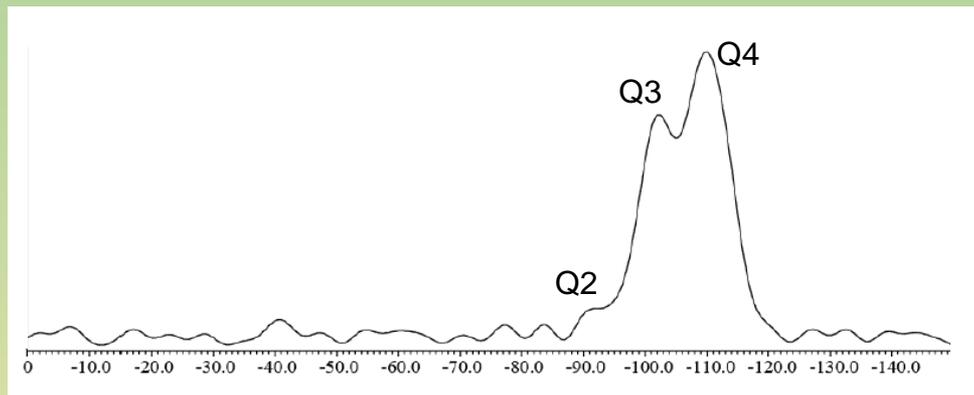


図2 第2近接ケイ素を含めたシリカ基本構造体の同定と定量