

NMRの基礎知識【原理編】

2022/11/10

特集ページ (有機合成)



本記事はWEBに混在する化学情報をまとめ、それを整理、提供する化学ポータルサイト「Chem-Station」のご協力のもと、提供しています。

[Chem-Station](#) について

NMRとは **核磁気共鳴 (Nuclear Magnetic Resonance)** の略称です。ざっくりいうと 構成原子の置かれた環境を1つ1つ区別して調べることができ、原子同士のつながり方もわかる測定法です。測定が簡便な割に多くの情報が得られるため、特に有機化合物を扱う分野では重宝されます。毎日10本を超える測定を行うことも珍しくありません。

本シリーズでは、NMRの原理から実例までをできるだけ分かりやすくご紹介したいと思います。今回は【原理編】です。

核磁気共鳴現象：その原理

原子核は正電荷をもち、自転しています(厳密にはコマのように **歳差運動** をしています)。これによって自ら磁場を発生させています。言い換えると、原

記事検索



おすすめ記事



電池研究関連特集



ビロリジジナル
カロイド(PAs)関
連特集



クリックケミスト
リー関連特集

アーカイブ

- > 2023年12月 (1)
- > 2023年11月 (1)
- > 2023年10月 (2)
- > 2023年07月 (3)
- > 2023年02月 (1)
- > 2022年11月 (4)
- > 2022年09月 (1)
- > 2022年08月 (1)
- > 2022年07月 (1)
- > 2022年06月 (1)
- > 2022年05月 (1)
- > 2022年01月 (1)

> [アーカイブ全てを表示](#)

カテゴリ

特集ページ (有機合成) (11)

特集ページ (分析) (9)

特集ページ (ライフサイエンス) (5)

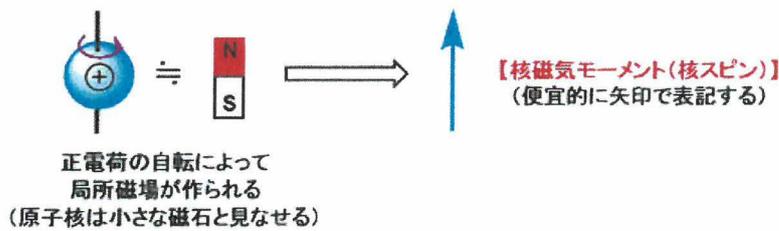
特集ページ (触媒) (4)

特集ページ (日本薬局方) (3)

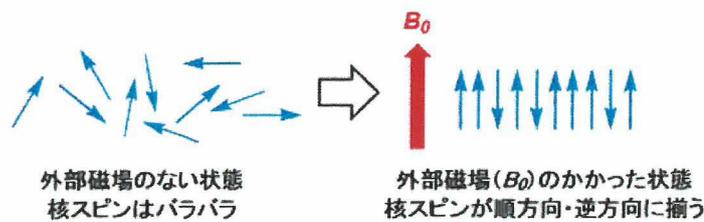
特集ページ (電子材料) (1)

特集ページ (素材研究) (1)

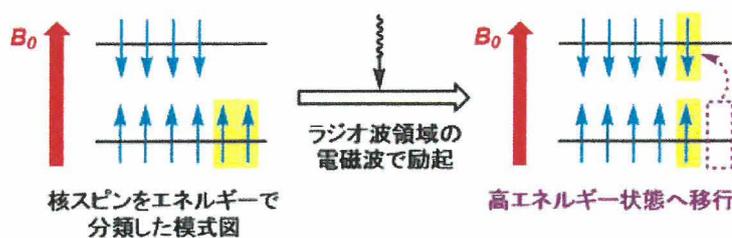
子一つ一つは、小さな磁石とみなすことができます。このことを表すベクトル物理量を、核磁気モーメント(核スピン)と呼びます。



普通の状態だと原子核はランダムな方向で回転しますので、核スピンの向きは当然ばらばらです。しかし、外部から強力な磁場(強さ B_0)をかけてやると、核スピンは磁場と順並行(\uparrow)または逆並行(\downarrow)の2種類へと綺麗に整列してくれます。



このとき、逆並行(\downarrow)の核スピン状態は、外部磁場と逆らう形になっているので、順並行(\uparrow)に比べてエネルギーが高くなります。外部磁場の影響により、核スピンの2つのエネルギー順位へ分裂することをゼーマン分裂と呼びます。ゼーマン分裂状態になると、エネルギー差に相当する電磁波に対して系が共鳴する(≒特定の波長をもつ光で高エネルギー状態へ励起される)ようになります。これこそが核磁気共鳴と呼ばれる現象です。



NMRの場合、このエネルギーがラジオ波領域(波長=1 m~100 km)に相当します。様々な波長のラジオ波をパルスとして一挙に当ててやると、上記エネルギー差に相当する波長のみで吸収が起こります。この様子を解析してやることで、核スピン(≒原子核)の置かれた状態が分かるのです。

測定装置

NMR測定装置は、大まかに①超伝導磁石(磁場発生部) ②分光計(ラジオ波照射・信号受信部) ③コンピューター(操作及びデータ処理部)に分かれます。

特集ページ (微生物)
(1)

トピックス (1)

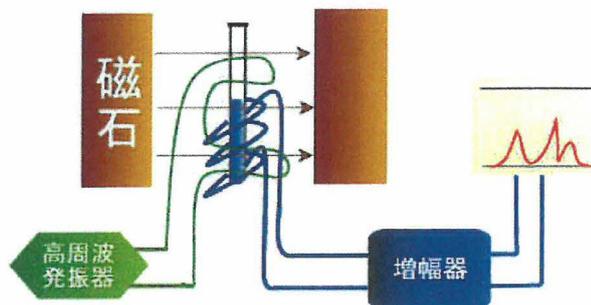
> カテゴリ全てを表示

タグ



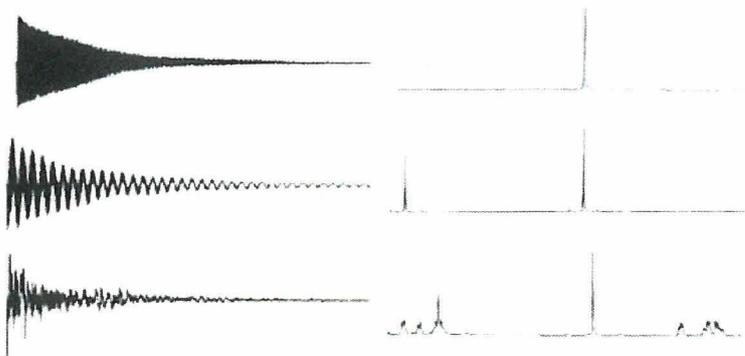
NMR装置の構成([JEOL RESONANCEのページ](#)より引用)

サンプル挿入・測定時の状態を模式的に表すと、下図のようになります。



サンプル管に磁場をかけ、高周波発振器によってラジオ波をあてると、上述の原理に従って核磁気共鳴が起こります。このとき、試料を取り巻いているコイルに微小な誘導電流が放出されるので、増幅器を経由させて自由誘導減衰(FID)信号としてこれを記録します。

実際には、FIDは様々な波形の重ね合わせとして記録されますので、コンピュータで波数成分ごとに分離(フーリエ解析)してやります。そうすると、我々の目になじみ深いNMRチャートが得られてきます。



左：FID信号、右：フーリエ変換後のNMRチャート([こちらのページ](#)より引用)

測定できる核種

原理の項で既に述べたとおり、NMR現象には核スピンの存在が必要です。核スピンの有無は、スピン量子数(I)という物理量で判断できます。

この値は、原子核に含まれる陽子数・中性子数が奇数か偶数かに依っています(下表)。質量数が奇数であれば、 $I=1/2, 1, 3/2, \dots$ などのように、整数値か半整数値をとります。偶数であれば、 $I=0, 1, 2, \dots$ のように0か整数値をとります。

質量数	原子番号	スピン量子数 I	核種の例
奇数	奇数、偶数	半整数($1/2, 2/3, 2/5, \dots$)	$^1\text{H}, ^{15}\text{N}, ^{13}\text{C}, ^{17}\text{O}, ^{19}\text{F}, ^{31}\text{P}, ^{129}\text{Xe}, \dots$
偶数	偶数	0	$^{12}\text{C}, ^{16}\text{O}, ^{28}\text{Si}, ^{32}\text{S}, \dots$
偶数	奇数	整数($1, 2, 3, \dots$)	$^2\text{D}, ^{14}\text{N}, \dots$

ここで重要なことは、スピン量子数 $I=0$ の核種は核スピンを持たないので、核磁気共鳴を示さないという事実です。たとえば、上表の $^{12}\text{C}, ^{16}\text{O}, ^{28}\text{Si}, ^{32}\text{S}$ などは $I=0$ となる典型核種なので、NMRの測定ができません。逆にそれ以外の核種は測定できます。

有機化合物の測定で最もよく用いられる核種は、水素核 ^1H と炭素核 ^{13}C です(どちらも $I=1/2$)。

水素核 ^1H は天然同位体存在比がほぼ100%であり、なおかつ最も感度のよい核の一つです。このため、試料が数mgあれば十分きれいなスペクトルが得られます。

他方、炭素核 ^{13}C の天然同位体存在比は1.1%($I=0$ である ^{12}C が大半を占める)であり、また感度も ^1H の1/4ほどしかありません。このため一般に ^{13}C -NMRは非常に微弱な信号として観測されるのみで、測定には多めのサンプルを必要とします。

【測定・解析編】は [こちら](#)

[NMR用重水素化合物はこちら](#)

→

[<前の記事](#)

[次の記事>](#)

企業情報

ごあいさつ
会社概要（組織）
経営理念
企業行動規範
事業分野紹介
沿革
事業所一覧（国内事業所、工場・研究所）
海外関連会社・国内関連会社

製品情報

試薬
ライフサイエンス
微生物検査
ファインケミカル・医薬・食添
電子材料
臨床検査薬
システム・機材・装置

研究開発

研究体制
研究所紹介
研究発表／論文
研究発表／外部発表
技術紹介(特集ページ一覧)
公的研究費の管理について

サステナビリティ (CSR)

CSRレポート
CSR活動への取り組み
推進体制
女性の活躍と次世代育成の取り組み
マネジメントシステム・品質保証
透明性に関する指針

採用情報

販売店一覧
資料ダウンロード
ケミカルタイムス
お問い合わせ

電子版総合カタログ

試薬と関連法規
試薬のご購入とご使用に際して
カタログ本文および製品ラベルの表示例
取扱い会社一覧

[サイトマップ](#)[サイトのご利用について](#)[プライバシーポリシー](#)

Copyright © KANTO KAGAKU. All rights reserved.