核磁気共鳴分光装置（NMR）の紹介

京都府中小企業技術センター中丹技術支援室に整備されている核磁気共鳴分光装置（NMR）の原理と測定についてご紹介します。

この装置は有機化合物の構造解析に使用され、化学合成物や食品などからの抽出物の構造の推定に役立てることができます。

機種

日本電子（株）JNM－ECX400P、磁場強度9.39T(400MHz)、測定核種^{1}H、^{13}C

貸付料金

1時間当たり　16,000円

原理

磁気核（水素原子：^{1}H）を含んだ化合物を磁場の中に入れると、磁気核のエネルギーは二つに分裂します（図１）。ここに一定の条件を満足する電磁波を加えると水素原子はエネルギーを吸収し、遷移（高エネルギー状態へ移る）を起こします。これを核磁気共鳴といいます。この吸収エネルギーを電気的に測定することによりNMR信号が得られます。装置の構成は図２のようになっています。超伝導磁石の中にサンプルを入れたチューブを入れ、電磁波の発信、受信、信号処理をコンピュータによって行い、スペクトルの測定を行います。

図１

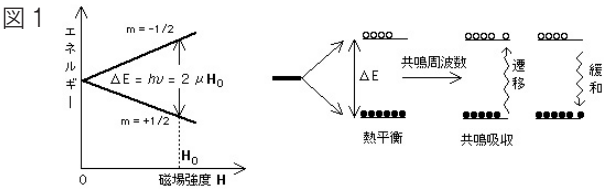
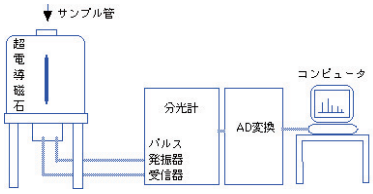


図２



測定

エタノール（CH_3-CH_2-OH）をNMRで測定すると図３のようなスペクトルが得られます。横軸は化学シフトといい、水素原子の位置する化学構造的環境によって、現れるスペクトルの位置が異なるので、化学シフトの位置から、どのような種類の分子パーツの水素原子からの信号かが推定できます。図４に代表的な分子パーツの化学シフトの位置を示します。

また、当センターの装置のような高分解能を持った装置で測定すると、図３の上段のようにスペクトルの微細構造が観測されます。その分子パーツに隣接する分子パーツ内の水素原子との相互作用によるスペクトルの分裂が測定され、隣接分子パーツの情報が得られます。エタノールの場合、１重線は隣接分子パーツ内の水素原子に影響を受けないことを示し、３重線は隣接分子パーツ内に影響を受ける水素原子が２個（-CH_2）あることを示し、４重線は３個（-CH_3）あることを示します。また、スペクトルの強度は水素原子の数に比例するので、水素原子の数の割合が分かります。このような情報を総合して有機化合物の分子パーツの並び方（化学構造）の解析を行います。

図３

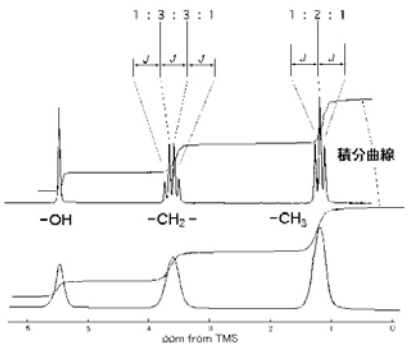
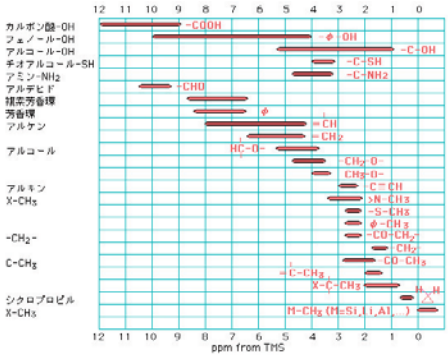


図４



（注）図１～４は北海道大学理学部生物科学科（高分子機能学）のホームページから引用しました。
http://altair.sci.hokudai.ac.jp/g5/jikken/NMR2.html#1

【お問い合せ先】
京都府中小企業技術センター
中丹技術支援室
TEL：0773-43-4340　FAX：0773-43-4341
E-mail：chutan@mtc.pref.kyoto.lg.jp