

演習問題 第1章

1) 本書では不対電子がない場合の NMR を扱う。以下の金属イオンで不対電子を持たないものを選べ。

- a) 典型金属イオン：Li⁺ , Ca²⁺ , Al³⁺
- b) 遷移金属イオン：Cu²⁺ , Mn²⁺

解答例)

- a) 全部持たない
- b) 全部持つ

筆者の感想)

b) は Co⁺, Co²⁺, Co³⁺ にした方が良かった。

2) 電子の磁気回転比と水素核（陽子）の磁気回転比を比較し、同じ磁場中で電子のゼーマンエネルギー差は水素のその何倍であるか計算せよ。

解答例)

式 (1.1) からエネルギーの比は磁気回転比 γ の比であり、表紙裏の表から、

$$\frac{1.9446 \times 10^{11}}{2.67522 \times 10^8} \sim 727 \quad (1)$$

あれれ?)

良く聞く約 660 倍ってのにならない?? で、調査したら...表紙裏の電子の γ の値が間違っていました。[言い訳] 表紙裏の表はライブラリ-15 の ESR のものをコピーしたので...

訂正)

表紙裏の「磁気共鳴に関連する定数」で電子の $\gamma \sim -1.76086 \text{ rad s}^{-1}\text{T}^{-1}$ に訂正してください。ついでに、プロトンの磁気回転比の単位に rad を追加しておいてください。入試問題だったら記者会見ものですね。

3) 陽子の磁気回転比を $\gamma = 2.675 \times 10^8 \text{ s}^{-1}\text{T}^{-1}$ として 7 テスラの磁場で室温 300 K の場合に上下のゼーマンエネルギーレベルの差をジュール単位で計算せよ。ただしプランク定数は $\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}$ である。

解答例)

式(1.1)から

$$\begin{aligned} E &= \gamma \hbar B_0 \\ &= 2.676 \times 10^8 \times 1.05 \times 10^{-14} \times 7 \\ &\sim 1.968 \times 10^{-25} \text{ J} \end{aligned} \quad (2)$$

コメント)

NMRに係わるゼーマンエネルギーはとても小さいことを実感して貰う狙いです。問5も同じ狙いです。

4) 問3のゼーマンエネルギーレベルを考え、温度 300 K でボルツマン分布しているスピンの個数の比 $N_{-1/2}/N_{1/2} = \exp(-\delta E/kT)$ を求めよ。

解答例)

単に数字を代入して、0.99995 を得る。

感想)

問題文の γ や \hbar の有効数字を上げておかないと!

訂正)

問3の問題文章で磁気回転比を $\gamma = 2.67522 \times 10^8 \text{ rad s}^{-1}\text{T}^{-1}$ 、プランク定数を $\hbar = 1.05459 \times 10^{-34} \text{ Js}$ に変更。

5) 問3のゼーマンエネルギーの差は赤外吸収で 1700 cm^{-1} に現れる C=O の伸縮振動のエネルギーに比べて何分の1になるかを計算せよ。

解答例)

まず、 1700 cm^{-1} を J にする。

$$\begin{aligned} E &= h\nu = h \frac{c}{\lambda} \\ &= 6.626176 \times 10^{-34} [\text{Js}] \times \frac{2.997924558 \times 10^8 \text{ms}^{-1}}{170000^{-1}\text{m}} \\ &\sim 3.377 \times 10^{-20} [\text{J}] \end{aligned} \quad (3)$$

問3の値と比べると約17万倍になる。

コメント)

なんとNMRのエネルギーは赤外吸収の17万分の1。磁場中で赤外吸収とNMRを同時

に行っても赤外吸収にゼーマン分裂が現れることはない… 磁場が10万倍になれば… 中性子星でやったらいい？

[誤植]

上記の「訂正」以外に1章には明らかな誤植は未だ見つかってないです。

・2ページの下から9行目の「ラジカルなどの不対電子を持たない分子」に関して、ラジカルは分子ではなく不対電子の例です。ラジカルは分子じゃないでしょ？