演習問題　第３章

1) 式（3.3）を導け.

解答例）
懐かしの部分積分を２回使って以下の様に計算する.

$$
\begin{aligned}
A &= \int_0^\infty \exp(-t/T_2)\cos(2\pi\nu t)dt \\
&= [(-T_2)\exp(-t/T_2)\cos(2\pi\nu t]_0^\infty \\
&- \int_0^\infty (-T_2)\exp(-t/T_2)(-2\pi\nu)\sin(2\pi\nu t)dt \\
&= T_2 - (2\pi\nu T_2)\int_0^\infty \exp(-t/T_2)\sin(2\pi\nu t)dt \qquad (1) \\
&= T_2 - (2\pi\nu T_2)\{[(-T_2)\exp(-t/T_2)\sin(2\pi\nu t]_0^\infty - (-T_2)(2\pi\nu)A
\end{aligned}
$$

A に関する式を解いて

$$A = \frac{T_2}{1+4\pi^2T_2^2\nu^2} \qquad (2)$$

2) 式（3.2）で cos ではなくて sin 成分の信号が得られたとする．$V(t) \sim \sin(2\pi\nu_i t)$．対応するスペクトル線形をフーリエ変換して求めよ.

問１の解の途中の式 (1) から

$$
\begin{aligned}
\int_0^\infty \exp(-t/T_2)\sin(2\pi\nu t)dt &= \frac{T_2 - A}{2\pi\nu T_2} \\
&= \frac{2\pi\nu T_2^2}{1+4\pi^2T_2^2\nu^2} = 2\pi\nu T_2 \times A \qquad (3)
\end{aligned}
$$

つまり線形は図 3.2 の線形 A に $2\pi T_2\nu$（原点を通る傾き $2\pi T_2$ の直線）をかけたものであるので，いわゆる分散線形（面倒なので描かない）を示す.

3) 9.4 T の磁場で ^{13}C のスペクトルの観測幅は 25 kHz 前後が適当である．観測に必要な FID 信号のサンプリング間隔を計算せよ．また，同じ磁場で水素核 ^{1}H の観測幅は 5 kHz となる．^{1}H に必要なサンプリング間隔を求めよ.

解答例）

$dw = 1/sw = 1/25 \times 10^3 = 40\mu\mathrm{s}$

4) 問３で ^{13}C の線幅は 1 Hz であったとする．FID 信号として何ポイント以上測定する必要があるかを，観測幅 25 kHz と 40 kHz の場合に求めよ．

解答例）

ポイント数 $n \gg T_2/dw = T_2 sw$ が必要であり，線幅 1 Hz から T_2 を $\frac{1}{\pi T_2} = 1$ の式から求めて，観測幅 $sw = 25$ kHz と共に代入すると，ポイント数としては 8000 点程度は最低必要になることが示される．観測幅が広い 40 kHz の場合は代入すると 13000 点は必要である．

コメント）

これらのポイント数は本当の最低限 (式の $\gg$ の意味) なので，実際はこの数倍が必要になる．

5) $T_2 = 1$ s である FID 信号に $b = 10$ Hz の指数関数をウインドウ関数として用いた．フーリエ変換して得られるピークの線幅は何倍になるか求めよ．

解答例）

ウインドウ処理後は減衰項が $\exp\{-t(b + 1/T_2)\}$ となるので，見かけの T_2* は

$$1/T_2* = b + 1/T_2 = 10 + 1 = 11 \tag{4}$$

つまり 11 倍になる．

6) FID データとしてサンプリング間隔 10 μs で 512 点を測定し，512 点ゼロフィルして全部で 1024 点でフーリエ変換してスペクトルを得た．このスペクトルの周波数軸のデジタル分解能を求めよ．

解答例）

$\delta = sw/N = 1/(dwN) \sim 97.7$ Hz.

コメント）

つまり，スペクトルを表すポイント間の周波数差は 98 Hz もあるので，線幅が細いピークは隙間に落っこちてしまうかも ‥

［誤植］

今の所，３章に明らかな誤植は未だ見つかってないです。