

## 演習問題 第4章

1)  $^1\text{H}$  の共鳴周波数が 500 MHz の静磁場の強度は何テスラであるか計算せよ。また、この磁場における電子スピンの共鳴周波数はいくらか計算せよ。

解答例)

$500 \times 10^6 / 2\pi \times 2.67522 \times 10^8 = 11.7 \text{ T}$  になる。電子スピンの共鳴周波数は修正した電子の磁気回転比(章末問題解答例(第1章問2)参照)を用いると、329105.6 MHz、つまり、329.1 GHz になる。

2) 約 9.4 T の静磁場でベンゼンの水素が 400.00288 MHz に、TMS の水素が 400.000 MHz に現れたとする。ベンゼンを基準、つまり、0 ppm とすると、TMS のシフトは何 ppm になるか求めよ。

解答例)

式(4.2)を用いると

$$(400.0000 - 400.00288) / 400.00288 = -7.199948 \times 10^{-6} \quad (1)$$

つまり、約-7.2 ppm である。

コメント)

この問題で示されるように、どこを基準にとるかで、化学シフト差は変化する。

3)  $^1\text{H}$  に照射しているラジオ波強度が 10 G だったとすると、90度パルス長は何  $\mu\text{s}$  になるか計算せよ。

解答例)

10 G = 1 mT = 0.001 T なので、 $\nu_1 = \gamma B_1 / 2\pi = 2.67522 \times 10^8 \times 0.001 / 2\pi \sim 42577.5 \text{ Hz}$  になる。従って、360度回転するのに約 23.48  $\mu\text{s}$  となり、90度パルス長はその 1/4 で約 5.9  $\mu\text{s}$ 。

コメント)

この  $^1\text{H}$  で 10G が 42.6 KHz で対応する 90度パルス幅が 6  $\mu\text{s}$  という数字は、固体の NMR で  $^1\text{H}$  がからんだ双極子相互作用の大きさがその程度であるから基準となる強度として覚えておくと良い。つまり、固体試料の NMR で  $^1\text{H}$  がからんだ測定をするときに  $^1\text{H}$  に照射

する rf 強度は 10 G 以上 , 90 度パルス長は  $6 \mu\text{s}$  以下が必要という目安になる数字である .

4) 問 3 と同じ 90 度パルスを  $^{13}\text{C}$  で実現するために必要なラジオ波強度をガウス単位で計算せよ . また , 周波数単位では何 kHz になるか計算せよ ( 2 章の章末問題 6 参照 )

解答例)

磁気回転比の比を  $1/4$  とすると約 40 G . 周波数では上と同じく 42.6 kHz である .

コメント)

このように磁気回転比が小さい核スピンでは照射 rf 波に大電力アンプが必要になってくる .

5) ノイズ ( 雑音 ) が混じった信号を  $N$  回積算すると , 信号は  $N$  倍になり , ノイズは  $\sqrt{N}$  倍になる . これはノイズがランダムでその大きさは平均値 = 0 を中心にガウス分布しているとして求めることが出来る .  $\sqrt{N}$  倍になることを導出せよ .

解答例)

ノイズが従う正規分布を  $N(0, \sigma^2)$  とする ( $\sigma$  は標準偏差) . 中心極限定理よりこの母集団から取り出した  $n$  個の標本平均は  $N(0, \sigma^2/n)$  に従う . 従って , その標準偏差は  $\sigma/\sqrt{n}$  となり ,  $n$  個の積算して、 $n \times \sigma/\sqrt{n} = \sqrt{n}\sigma$  となる .

コメント)

なにをどこまで証明したら良いのか判らない悪い問題になってしまってますね . 反省...