

核磁気共鳴 (Nuclear Magnetic Resonance : NMR)

型式 MODEL

BRUKER デジタル NMR装置 AV 300M型

原理 PRINCIPLE

核スピン量子数 I が 0 でない原子核は磁気双極子モーメントを持っており、小さな磁石とみなす事ができます。

この原子核を強い磁場中に置くと、地球ゴマの様に歳差運動を始め、ゼーマン分裂によって $2I + 1$ 個のエネルギー状態になり、このエネルギー差に相当した電磁波(ラジオ波)に共鳴する様になります。

共鳴周波数は核種により異なりますが、同一各種においても、それぞれの原子核の置かれた化学的または磁気的環境に応じて差が生じます。

これは化学シフトと呼ばれ、NMRシグナルの化学シフトから化合物に含まれる官能基の種類を推定する事が可能になります。

仕様 SPECIFICATION

分光計	AVANCE III 300
磁場強度	7.05テスラ
共鳴周波数	300.13MHz ※ ¹ H
検出器	5mm ¹ H/ ¹⁵ N~ ¹⁹ F 多核種BBFO型プローヘッド
観測可能核	¹ H, ¹³ C

事例 APPLICATION

用途
工業製品の品質管理、劣化判定
有機合成試験における生成物の確認
薬物、天然物などの有機化合物などの構造解析



～ コールタールの品質管理【管理指標：芳香族プロトン(Ha)の割合[%]】～

$$\text{※ Ha [\%]} = \frac{\text{Haの積分値}}{(\text{Haの積分値} + \text{H}\alpha\text{の積分値} + \text{H}\beta\text{の積分値} + \text{H}\gamma\text{の積分値})} \times 100$$

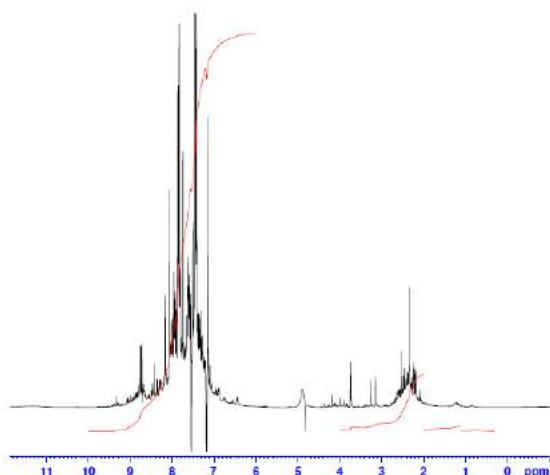


図1 コールタール_¹H-NMRスペクトル

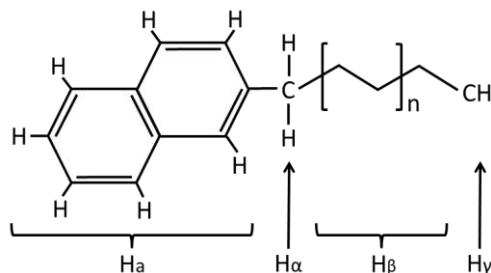


図2 コールタールの構造例

Ha : 芳香族プロトン(10.0~6.0ppm)

Hα : 脂肪族プロトン(4.0~1.8ppm)

Hβ : 脂肪族プロトン(1.5~1.0ppm)

Hγ : 脂肪族プロトン(1.0~0.5ppm)