

目 次

まえがき	広田 襄... i
------------	-----------

I 磁気共鳴の基礎

1 磁気共鳴の新しい動向	荒田洋治, 磯谷順一... 1
1 NMR	1
1.1 分光計の性能向上とその成果	1
1.2 今後の課題と期待	2
2 ESR	2
2.1 パルス法の導入とその成果	2
2.2 測定法の現状と今後の展開	3
2 パルス磁気共鳴の基礎	荒田洋治... 5
1 スピンと磁化	5
2 静磁場中におけるスピンの統計 的振舞いと磁化	6
3 パルス磁場と磁化ベクトルの動き	8
4 緩和	9

II NMR.

1 マルチパルス NMR	引地邦男...13
1 INEPT と DEPT	13
1.1 INEPT	13
1.2 DEPT	17
1.3 POMMIE	18
1.4 その他	18
2 INADEQUATE と 多量子遷移 NMR	19
2.1 INADEQUATE	19
2.2 多量子遷移 NMR	21
2.3 多量子フィルター	24
文 献	24
2 2次元 NMR——測定法の発展と応用展開	永山国昭...26
1 磁化の運動と位相	26
2 1次元スペクトルから2次元 スペクトルへ	28
3 2次元 NMR への飛躍——基 本2次元 NMR	30
4 2次元 NMR の発展——派生2 次元 NMR	33
4.1 各種2次元法の発展地図	33
4.2 COSY から SECSY へ	35
4.3 J分解法 (2DJ) へ	35
4.4 同種核から異種核へ	36
4.5 多量子遷移フィルター COSY へ	37
4.6 2次元 NOE およびリレー相関へ	38
5 各種2次元法の総括的利用—— 体系的帰属への応用	40
6 直積演算子によるパルス NMR	

の新しい記述	44	文献	48
6.1 直接演算子	44		
3 多核種 NMR		岩村 秀	50
1 $I=1/2$ の核の NMR	51	3.1 $I>1/2$ 核の緩和が遅い場合	60
2 $I>1/2$ の核の NMR	55	3.2 $I>1/2$ 核の緩和が速い場合	60
3 $I>1/2$ 核とスピン結合した $I=1/2$ 核の NMR	60	3.3 $I>1/2$ 核の緩和が中程度の場合	60
		文献	61
4 固体高分解能 NMR		寺尾武彦	62
1 固体高分解能 NMR の原理	62	CPMAS NMR	71
1.1 問題点	62	3 固体高分解能スペクトルの様相	71
1.2 異種核間双極子デカップリング	63	3.1 スピニングサイドバンド	72
1.3 マジック角度回転	63	3.2 定量性	72
1.4 交差分極	64	3.3 分子運動の影響	73
1.5 同種スピン間双極子デカップリング	65	3.4 分解能	74
1.6 複合技術による固体 NMR	67	3.5 感度	75
2 固体高分解能 NMR の意義と研究例	68	3.6 固体効果による吸収線の分裂と シフト	75
2.1 固体高分解能 NMR の意義	68	4 最近の技術の発展	76
2.2 β -キノール・メタノール包接化 化合物単結晶における ^{13}C NMR	69	5 参考文献の紹介	77
2.3 ポリアセチレンにおける ^{13}C		文献	78

III ESR

1 電子スピンエコー		桑田敬治	81
1 電子スピンエコーの原理とその測定	81	2.3 エコー減衰曲線に現れる核変調効果	87
2 電子スピンエコーを利用した各種 の研究例	84	2.4 ENDOR スピンエコーと ELDOR スピンエコー	89
2.1 溶液の T_1, T_2 と分子運動	84	2.5 ESE スペクトル	90
低粘度液体中の速い分子運動 84/ 遅い分子運動 85/2次元スピンエ コー 85		2.6 短寿命活性種のスピンエコーに よる観測	91
2.2 固相の T_1, T_2	86	文献	91
2 時間分解 ESR		吉田 宏, 広田 襄	93
1 電子スピンの異常分極	93	4 時間分解 ESR 測定の実例	101
1.1 励起三重項機構	93	4.1 光化学反応の CIDEP	101
1.2 ラジカル対機構	95	4.2 放射線化学反応の CIDEP	102
2 時間分解スペクトルと CIDEP	97	文献	102
3 時間分解 ESR 測定法	100		

3 多重共鳴法	工位武治, 伊藤公一	104
1 電子スピン多重共鳴分光法		104
1.1 はじめに		104
1.2 通常の電子スピン多重共鳴法		104
1.3 光検出電子スピン多重共鳴分光法		105
2 多重共鳴分光法の原理と特徴		106
3 多重共鳴における遷移周波数および遷移確率		108
4 最近の電子-核二重共鳴		108
4.1 円偏光 RF-ENDOR		108
4.2 偏極変調 ENDOR		110
4.3 核ゼーマン相関 ENDOR		111
4.4 電子スピンエコー ENDOR		113
5 最近の電子-核-核三重共鳴		114
5.1 TRIPLE		114
5.2 CP-TRIPLE		116
5.3 多重共鳴における核スピンドカップリング		117
6 最近の光検出多重共鳴		118
文 献		119
4 飽和移動 ESR	大野桂一, 相馬純吉	122
1 測定方法のあらまし		123
2 これまでの研究成果		125
3 最近の研究		126
文 献		126

IV 磁気共鳴の新しい応用

1 構造解析への応用	鈴木喜隆, 後藤俊夫	129
1 有機化合物の構造解析——1次元 NMR と 2次元 NMR		129
1.1 INEPT 法		129
1.2 シフト相関 2次元 NMR		130
1.3 <i>I</i> 分解 2次元 NMR		133
1.4 NOE 相関 2次元 NMR と NOE 差スペクトル		137
1.5 INADEQUATE 法		137
2 その他の手法		139
2.1 LSPD 法		139
2.2 LRJR 法		139
2.3 生合成研究への応用		139
文 献		141
2 高次構造解析への応用		143
A NMR による生体高分子のコンホメーション解析		
	遠藤斗志也, 宮沢辰雄	143
1 DNA の sequential な帰属		144
2 蛋白質の sequential な帰属		146
3 高次構造推定法		148
文 献		151
B 蛋白質の高次構造のゆらぎ	赤坂一之	153
1 蛋白質はゆらいでいる		153
2 NMR からゆらぎをどう検出するか		155
3 SSI にみられる蛋白質のゆらぎの実際		156
3.1 露出したセグメントに存在するゆらぎ		156
3.2 コアに存在するゆらぎ		157
文 献		159

3 高分子化学への応用	中條利一郎	160
1 NMR 的にみた高分子系の特徴	160	
2 局所粘度	160	
3 コンフィグレーション	161	
4 重合機構	162	
5 コンホメーション	163	
6 共重合連鎖	164	
7 ポリペプチドのヘリックス-コイル転移	165	
文献	165	
4 溶存状態の研究への応用	舟橋重信	167
1 溶媒との相互作用	167	存状態
2 金属イオンの溶媒交換	168	5 無機化合物の溶存状態
3 微視的酸解離平衡	170	6 溶存会合体
4 アミノポリカルボン酸錯体の溶		文献
5 固相における分子運動の研究	中村巨男	176
1 運動による尖鋭化	176	3 特殊な運動
2 緩和時間	179	文献
6 生体関連錯体研究への ESR の応用	石津和彦, 大矢博昭	185
1 ヘム鉄蛋白の構造および機能と ESR	185	／金属配位酸素 189
2 酸素錯体の電子状態	186	2.2 ポルフィリン環の電子状態
2.1 酸素および活性酸素種	186	3 P-450 モデルによる活性酸素と ESR
励起酸素分子 186 / 酸素還元種 187		文献
7 常磁性活性種の新しい研究		
A ラジカルイオン	志田忠正	198
文献	200	
B 励起三重項状態	広田 襄	203
文献	206	
C 基底多重項状態	伊藤公一	208
文献	211	
8 スピンプローブ		
A スピンプローブ法とスピンラベル法	渡部徳子	213
1 スピンラベル, スピンプローブからの情報	213	2 スピンラベル, スピンプローブの種類
		214

2.1 汎用性スピンラベル	214	3.3 遅い運動の場合	218
2.2 スピンラベルの新しい傾向	215	4 応用面での新しい展開	220
3 スペクトルの解析法	216	4.1 ヘテロアイソトープラベル法	221
3.1 理論的背景	216	4.2 NMR スペクトルの帰属	223
3.2 速い運動の場合	217	文 献	225

B スピントラッピング——水溶液系で2-メチル-2-ニトロソプロパン

を用いる方法	牧野圭祐, 波多野博行...	227
1 MNP を用いるスピントラッピング		227
2 スピントラップ水溶液の調製		228
3 MNP を用いるスピントラッピングの留意点		229
4 MNP のセルフトラッピング		229
5 スピンアダクト混合系の解析法		229
6 線幅交代		231
7 スピンアダクトの pK_a 値		232
文 献		233