

桑 原 大 介 (助手)

A-1) 専門領域：核磁気共鳴

A-2) 研究課題：

- a) スピンエコー-NMR法の新たな可能性
- b) ^{14}N overtone 断熱的反転パルスを用いた REDOR 現象の観測

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) マジック角試料回転 (MAS) とスピンエコー-NMR法の組み合わせは、これまではもっぱら固体状態のスピン系の間接スピン-スピン結合を測定するために用いられてきた。我々はMAS条件下でスピンエコー-NMR法を炭素-炭素 (^{13}C - ^{13}C) スピン系に適用した。その結果、今までに観測されたことのない複数の共鳴線が出現した。我々は付加的な共鳴線の位置および強度を表す解析式を導いて、それらの共鳴線の位置が試料回転周波数と化学シフト等方位差により決まることを見出した。さらに付加的な共鳴線は同種核間双極子相互作用が存在する時のみ生じることがわかった。
- b) 固体粉末試料中の炭素-窒素核間距離を測定するために開発されたRotational echo double resonance (REDOR) NMR法は、測定対象となるスピン系の窒素核を ^{15}N で同位体置換しないと使えない。本研究では、天然で99.6%の存在比をもつ ^{14}N をそのまま用いてREDORの実験を行うことを試みた。固体粉末試料中の ^{14}N スピンは、大抵1 MHzを超える核四極子結合定数をもつため、いままではほとんどNMR測定で利用されることがなかった。本研究では、overtone断熱的反転パルスを使って ^{14}N スピンの磁化を反転させることを行った。

B-1) 学術論文

H. FUJIMORI, D. KUWAHARA, T. NAKAI and S. MIYAJIMA, “Transient ^{13}C - ^1H nuclear overhauser effect in liquid crystal,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **70**, 1117 (2001).

D. KUWAHARA, T. NAKAI, J. ASHIDA and S. MIYAJIMA, “Real figure of two-dimensional spin-echo NMR spectra for a homonuclear two-spin system in rotating solids,” *Mol. Phys.* **99**, 939 (2001).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

D. KUWAHARA, T. NAKAI, J. ASHIDA and S. MIYAJIMA, “Novel structure discovered on two-dimensional spin-echo NMR spectra for a homonuclear two-spin system in rotating solids,” *Proceedings of 14th Conference of the International Society of Magnetic Resonance* 130 (2001).

C) 研究活動の課題と展望

MASを行っている粉末試料にスピンエコー-NMR法を用いると、核間距離に関する情報が簡単に手に入る。しかしながらこの手法では、隣り合った炭素-炭素間の距離しか測定することができない。それは付加的な共鳴線の強度が非常に小さいからである。今後は、比較的長い核間距離をもったスピン系に対してもこの手法を用いて距離情報を引き出すことを考えたい。また ^{14}N スピンのovertone断熱的反転パルスを用いたREDORの実験に関しては、 ^{13}C - ^{14}N スピン系のハミルトニアンを使った計算機シミュレーションを行って、最適な実験条件を求めることを試みる。