

目 次

1. 基礎理論	1
¹³ C NMR 分光学の歴史.....	1
緩和と核 Overhauser 効果 (NOE).....	5
装置がみたすべき条件	8
パルス法の一般原理.....	8
ラジオ波パルスをあてた場合の磁化の性質.....	11
時間領域と周波数領域.....	13
FT NMR 分光器の構成要素.....	14
¹³ C NMR スペクトルの外観	21
2. スペクトルのパラメーター	25
化学シフト	25
核シフトの理論.....	25
分子内でのシフト効果の伝達.....	29
経験的関係：置換基効果.....	40
加成性の経験式.....	44
結合定数	54
理論.....	54
C—H 結合定数.....	56
C—C スピン結合定数.....	61
炭素と他核のスピン結合.....	67
3. 帰属法	71
方法の概要	71
単一周波数デカップリング法	73
オフレゾナンスデカップリングの原理.....	73
オフレゾナンススペクトルの二次効果.....	80
グラフ法によるオフレゾナンススペクトルデータの解釈.....	83
選択デカップリング法.....	86
遠隔 ¹³ C—H スピン結合の残余分裂.....	91
単一共鳴スペクトル.....	93

ゲート付きデカップリング法	93
^{13}C - ^1H 遠隔スピン結合による芳香環炭素の帰属	93
遠隔スピン結合の帰属	100
第四級炭素低出力の選択デカップリング	101
結合 3 本を隔てた結合定数 ($^3J_{\text{CH}}$) の立体特異性	103
スピン結合定数の相対符号の決定	104
ランタニドシフト試薬	107
擬コンタクトシフト	107
定性的情報	109
Fermi コンタクト相互作用	112
ランタニド試薬でシフトさせたスペクトルの選択デカップリング	113
反磁性シフト試薬	115
標識化合物を用いる帰属法	115
^{13}C 標識	115
重水素標識	119
化学シフトの比較	122
^1H 以外の核とのスピン-スピン結合	127
スピン 1/2 の ^{19}F および ^{31}P とのスピン結合	127
^{13}C - ^{31}P スピン結合定数の立体特異性	128
ヘテロ原子が関与する結合定数の符号の決定	130
^{13}C - ^{13}C スピン結合	134
4. 核スピン緩和	143
相関関数とスペクトル密度関数	144
双極子-双極子緩和	147
ほかの緩和機構	151
スピン回転	151
化学シフト異方性	152
スカラー緩和	152
T_1 と NOE 測定のための実験技術	154
反転回復法	154
漸次飽和法	157
飽和回復法	158
NOE の測定	159

回転相関時間の温度および濃度依存性	161
各種緩和機構の相対的寄与	162
電子-核緩和	163
5. 応用	167
序論	167
有機化合物の構造決定	167
天然物	191
立体化学と幾何異性	204
カルボカチオンとカルバニオン	209
動的過程および配座解析	216
分子内転位, 可動分子	218
配座平衡と立体配置の反転	223
巨大分子	235
合成高分子	235
重合体の立体規則性	236
ジエン重合体	243
生体高分子	249
タンパク質	252
反応機構の研究	259
反応機構の解明	260
生合成における ^{13}C 標識	264
スピン-格子緩和および核 Overhauser 効果の研究	270
構造決定への応用	270
分子全体の異方性運動	281
巨大分子における双極子緩和	284
常磁性緩和試薬	287
定量分析	289
応用	293
付録 問題の解答	302
索引	333