

目 次

第 1 章 分光法としての磁気共鳴—スピン分光法	1
1.1 分光法の概要	1
1.2 電磁波と分子の相互作用	4
1.3 分子内のエネルギー準位と分子構造	7
1.4 エネルギーから構造を決めるための方法	12
1.4.1 スペクトルと構造をつなぐ量子化学的手法	12
1.4.2 遷移強度とスピン分光	13
演習問題	19
第 2 章 電子スピンとそのエネルギー	22
2.1 電子スピン	22
2.1.1 磁場中の電子スピンの運動	31
2.1.2 スピンエネルギーの観測	33
2.2 電子スピンを含む相互作用	34
2.2.1 軌道運動との相互作用	35
2.2.2 核スピンとの相互作用	38
2.2.3 電子スピン間の相互作用—2 電子系	48
2.2.4 ESR スペクトルの異方性	63
演習問題	73

第3章 ESRの時間依存性と分子のダイナミクス	77
3.1 熱平衡とスピン緩和	77
3.2 化学反応によるスピンの生成と消滅	84
3.2.1 三重項機構 (TM)	88
3.2.2 ラジカル対機構 (RPM)	88
3.2.3 スピン相関ラジカル対機構 (SCRPM)	92
3.3 直接検出による時間分解測定	95
3.4 間接測定法—線幅の解析	97
演習問題	99
第4章 電子スピン共鳴の測定法	106
4.1 ESR法の原理	107
4.1.1 磁化の章動運動	107
4.1.2 スピン緩和の効果	113
4.1.3 緩和に対して共鳴吸収が無視できるほど小さい場合	114
4.2 磁場変調 ESR	115
4.3 時間分解 ESR	118
4.4 パルス ESR	121
4.4.1 自由誘導減衰 (FID)	122
4.4.2 電子スピンエコー (ESE)	127
4.4.3 ナイキストの定理 (サンプリング定理)	135
4.5 高周波—高磁場 ESR	139
4.6 二重共鳴法	141
4.6.1 電子—核二重共鳴 (ENDOR)	142
4.6.2 電子—電子二重共鳴 (ELDOR)	150

演習問題	151
第5章 応用例	154
5.1 金属錯体の構造と電子状態	154
5.2 固体の励起三重項における状態の混合	157
5.3 溶液中の励起三重項	161
5.4 光励起多重項への高周波 ESR の応用	165
5.5 光励起多重項の章動スペクトル	168
5.6 人工光合成系と反応中間体ラジカルイオン対	171
5.7 距離測定	175
演習問題	180
演習問題解答	182
参考文献	200
巻末付表	203
索引	205

コラム目次

1. エネルギーの表し方	4
2. 光電効果	6
3. 系, 状態, 準位	10
4. 波動関数と演算子	19
5. スピン量子コンピュータ	21
6. 角運動量	24
7. 磁気モーメントとスピン角運動量	29
8. スピン-軌道相互作用	37
9. 異方性, 主値, 主軸	39
10. 電子の交換における波動関数の対称性	53
11. クーロン積分と交換積分	55
12. ESR イメージング	70
13. 固体パラ水素と ESR	71
14. 色鮮やかな超薄型テレビの鍵を握る電子スピン	72
15. 磁性, 磁化, 分極	81
16. 共鳴吸収の線形	83
17. 量子力学的な状態の重ね合わせ	93
18. 鳥の化学コンパス	100
19. タンパク質・機能性分子の光エネルギー変換機構	101

20. イオン液体とスピンの化学	102
21. マイクロ波の検出	119
22. マイクロ波共振器	120
23. 周波数帯域	124
24. ミキサーによる FID の検出	128
25. 核変調効果 (ESEEM: Electron Spin Echo Envelope Modulation)	137
26. フーリエ変換 (Fourier Transform)	140
27. 核四重極子相互作用	148
28. 遷移金属イオンの電子配置	158
29. 角運動量の結合	169
30. タンパク質の構造解析	179