

問題1. 核磁気共鳴(NMR)の実験によって、分子の何が分かるか?主なものを4つ答えよ(16点)。

問題2. 2002年のノーベル化学賞は、核磁気共鳴(NMR)分野での新手法開発の功績によりスイス連邦工科大学のKurt Wüthrich教授に授与された。この新手法の具体的な内容を150字以上で説明せよ(14点)。

問題3. 生体高分子の研究に広く用いられている手法には、核磁気共鳴(NMR)法とX線回折法がある。X線回折法と比較したときのNMR法の長所と短所を各々4項目以上挙げよ(16点)。

問題4. 固有値、固有関数、エルミート演算子、実数の関係を100字以上で説明せよ(式を含んでも良い)(14点)。

問題5. 右下の図は、スピン結合をしていない水素の単一核に対するパルスNMR実験の概要を示している(緩和を考慮しない)。 $\rho$ は、この核に対する時刻  $t$  での密度行列を示している。また、スピン演算子(=パウリ行列)を  $I_x, I_y, I_z$  とする。以下の問いに答えよ。

1)  $\alpha^0_x$  パルスを表すハミルトニアンを  $H$  とし、 $\rho_1$  と  $\rho_0$  の関係をあらわす式を書け(5点)。

2)  $\rho_0$  が  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  であるとして、 $\rho_1$  を表す行列式を  $\sin \alpha$  と  $\cos \alpha$  を使って書き表せ(10点)。

3)  $\alpha = 90$  ( $90^\circ_x$  パルス) のときの  $\rho_1$  を、行列式およびスピン演算子を使って書き表せ(各5点)。

4)  $\rho_1$  は化学シフトのハミルトニアン ( $H = \omega I_z$ ) によって  $\rho_2$  に変化する。 $\alpha = 90$  ( $90^\circ_x$  パルス) のときの  $\rho_2$  を表す行列式を  $\sin \omega$  と  $\cos \omega$  を使って書き表せ(15点)。

