

The background of the book cover features a series of stacked NMR spectra. The top portion is a dark red background with several sharp, black-outlined peaks. Below this, the background transitions into a green gradient, with the NMR spectra appearing as dark green, filled-in shapes. The overall design is a stylized representation of nuclear magnetic resonance data.

# 实用核磁共振 波谱学

[法] M. L. 马丹 G. J. 马丹 J.-J. 戴尔布什 著

41.13

科学出版社

# 实用核磁共振波谱学

M. L. 马丹

[法] G. J. 马丹 著

J.-J. 戴尔布什

蒋大智 苏邦瑛 陈邦敏 译

梁晓天 校

科学出版社

1987

## 内 容 简 介

本书全面系统地讲述了核磁共振的实验方法和技术。全书共十章，内容包括核磁共振基本原理、各类仪器的使用、实验设计和步骤以及数据处理，并对多重照射技术、弛豫时间测量、动态核磁共振、定量分析和核磁共振各类助剂(位移试剂、手性试剂和弛豫试剂等)的使用方法作了专门介绍。书后有附录和物理常数表等。

本书可供从事核磁共振研究和应用的科技人员、研究生及高等学校有关专业的师生参考。

M. L. Martin, G. J. Martin, J.-J. Delpuech  
PRACTICAL NMR SPECTROSCOPY  
Heyden, 1980

## 实用核磁共振波谱学

M. L. 马丹

[法] G. J. 马丹 著

J.-J. 戴尔布什

蒋大智 苏邦瑛 陈邦钦 译

梁晓天 校

责任编辑 白明珠

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

\*

1987年2月第一版 开本：787×1092 1/32

1987年2月第一次印刷 印张：20 3/4

印数：0001—2,100 字数：467,000

统一书号：13031·3432

本社书号：4381·13—4

定价：4.85元

## 译 者 的 话

本书是一本介绍高分辨核磁共振波谱学实验方法和技术的专著，其最大特点是：第一，将连续波与脉冲 Fourier 变换统一结合在一起，内容全面系统；第二，各类实验方法介绍得很具体，而理论阐述贯穿其中，恰到好处，深入浅出，非常适用。本书对于在核磁共振方面已有一定实践经验的读者来说，是一本深入学习和研究核磁共振方法及技术的有益参考书，而对于一般读者来说，无疑也是一本全面了解和掌握核磁共振波谱学技术的难得教材。

本书作者是法国三位著名的核磁共振教授，其中前两位作者 Martin 夫妇曾于一九八〇年应邀来过我国讲学。本书的翻译工作就是从那个时候开始的。本书原版是用英文写成的。在翻译过程中，由于译者有机会与 Martin 夫妇经常接触并保持联系，原作者对原著的修改意见都已体现在译稿中了。尽管其中也有部分是译者所提，但都与原作者商榷过，在译文中均未加注。

梁晓天教授审校了全部译稿，并提出许多宝贵意见，在此深表谢忱。由于译者水平所限，译文中错误之处在所难免，欢迎读者批评指正。

## 致中国读者

一九八〇年我们荣幸地受到中国科学院蒋丽金教授的邀请，访问了中国。在中国逗留期间，有机会与中国核磁共振方面的专家和化学界同行们进行了有益的学术交流和讨论。本书的中译计划正是当时确定下来的。

现在看到自己的著作译成世界上有如此众多人讲述的一种语言文字形式，从而使它能在中国这样一个伟大而美丽的国家里广为传播，兴奋之余想借此机会向译者所做的大量工作表示诚挚的谢意。

我们衷心地希望《实用核磁共振波谱学》中译本，能对在化学、生物、医药和农业等领域中从事核磁共振应用研究的中国科技人员有所帮助。

M. L. 马丹

G. J. 马丹

1983年11月29日于法国南特

## 序 言

核磁共振波谱学自四十年代后期问世以来,已取得了令人瞩目的进展。其重要性表现在应用方面的不断增长,涉及有机化学和无机化学等广阔领域,现在又扩展到生物化学和生物医学领域。作为研究分子结构和动态学的工具,核磁共振仪器技术和方法学的成功应用是其不断进步的自然结果。已有许多著作谈到了核磁共振波谱学的发展历程,其中有些已成为经典著作。因此最近一些新书的内容大都是一些专题论述(来自核磁共振方法的一些新的重要的发展),或者主要讨论核磁共振的应用。尽管在这些书中有时也提到一些仪器性能和方法学方面的具体实验问题,但在这方面大量的主要材料目前还是分散在文献之中。撰写本书的目的,意在弥补这方面的不足,即想对高分辨核磁共振的实验方法和技术作一次全面的概括。

为此,我们在书中将由浅入深地论述核磁共振的基础知识及一些艰深之点,而不管它们的历史顺序。本书内容着重放在实验方法方面,包括各类仪器的使用,各项核磁共振实验的设计,以及进行谱图处理得到有用参数的方法。本书力求对初学者能有所裨益,希望能使他们了解到核磁共振的必要知识,并作为进一步研究更专门化文献的指南,对于那些在核磁共振方面已有所造诣的读者来说,通过本书他们将会从各种核磁共振方法和技术的理论工作方面得到一定的启发。

连续波核磁共振实验方法由于历史较早,已为化学家所熟知。但由于技术上的突飞猛进,脉冲 Fourier 变换核磁共振已被广泛采用且部分地取代了连续波方法。为了照顾那些已对连续波核磁共振有所了解的读者,并避免人为地将两种观测方法孤立起来对待,本书将它们结合在一起作为核磁共振技术的整体来叙述,对使用得越来越多的 Fourier 变换方法适当偏重一些。

实验结果的定量解释,甚至实验方法的正确与否,往往都求助于理论处理,因此本书不得不用一定的篇幅来介绍一些基本概念和理论。然而,介绍这些内容仅仅是为了讨论实际问题的需要。因此,书中在这方面一般只考虑理论的结果和应用,而并不给出推导过程。至于表述形式,通常选择那些最易于使用的。例如,旋转坐标向量是一种形象性的描述方法,用来解释核磁共振实验现象很合适,故在本书中经常使用。为了能对实验结果作出恰如其分的解释,我们着重论述理论推导中的近似处理,影响结论的各种因素,以及结果的准确性。书中还列举有一些实际例子和图表,供读者应用这些方法。

本书并不是核磁共振仪器方法和技术的详细述评,因而文献的罗列远非详尽。本书显然不可能包罗所有已出版的佳作,也不大可能将有过贡献的早期作者都一一提及。此外,由于本书主要是阐述核磁共振的方法学,书中一般不包括有关核磁共振的各种应用,尽管它们可能很重要。

本书使用的是国际单位制(SI),但在一些数据表或脚注中也经常注明对应的CGS单位。

作者对所有对本书写作和出版有过帮助的人们表示感谢。(以下从略)

M. L. 马丹

J.-J. 戴尔布什

G. J. 马丹

# 目 录

<b>第一章 基本概念</b> .....	1
§ 1.1 核磁共振现象.....	1
1.1.1 核的磁性质.....	1
1.1.2 核磁共振.....	7
1.1.3 时域和频域.....	8
1.1.4 不同的激发方式.....	9
§ 1.2 弛豫过程.....	9
1.2.1 纵向(自旋-晶格)和横向(自旋-自旋)弛豫.....	9
1.2.2 自旋-晶格弛豫机理.....	11
1.2.3 自旋-自旋弛豫机理.....	14
1.2.4 核的 Overhauser 效应 (NOE).....	15
§ 1.3 连续波实验.....	17
§ 1.4 脉冲实验.....	19
1.4.1 自由感应衰减和 Fourier 变换.....	19
1.4.2 数据采集和数字分辨率.....	20
1.4.3 谱的累加.....	21
§ 1.5 核磁共振参数.....	22
1.5.1 化学位移.....	22
1.5.2 自旋-自旋耦合.....	22
1.5.3 信号的多重性.....	23
参考文献.....	24
<b>第二章 核磁共振仪器简介</b> .....	26
§ 2.1 核磁共振波谱仪的基本组成.....	26
§ 2.2 性能指标.....	27
2.2.1 分辨率.....	27
2.2.2 稳定性.....	32
2.2.3 灵敏度.....	32
§ 2.3 核磁共振波谱仪的主要部件: 磁体.....	35
2.3.1 一般特点.....	35
2.3.2 电磁铁.....	38
2.3.3 永久磁铁.....	38
2.3.4 超导磁体.....	39
§ 2.4 商品波谱仪述评.....	40
2.4.1 常规 CW 60 MHz 波谱仪.....	41
2.4.2 常规 FT 波谱仪.....	41
2.4.3 90—100 MHz 波谱仪.....	41



2.4.4 超导线圈波谱仪 .....	42
<b>第三章 连续波核磁共振波谱仪的操作技术</b> .....	<b>43</b>
§ 3.1 电子线路 .....	43
3.1.1 信号处理的一般要求 .....	43
3.1.2 射频发射器 .....	45
3.1.3 射频接收器 .....	45
3.1.4 低频部分 .....	48
3.1.5 扫描和记录装置 .....	50
3.1.6 测量探头 .....	52
§ 3.2 最佳分辨率和灵敏度参数的选择 .....	53
3.2.1 射频和低频的磁场强度 .....	53
3.2.2 扫描速度 .....	55
3.2.3 滤波器的频带宽度 .....	57
3.2.4 灵敏度的增强 .....	58
§ 3.3 连续波核磁共振的操作 .....	59
3.3.1 概述 .....	59
3.3.2 标准的基本操作 .....	60
3.3.3 记录频谱的操作 .....	65
§ 3.4 波谱仪的多核功能 .....	66
3.4.1 变频操作 .....	67
3.4.2 变场操作 .....	67
参考文献 .....	68
<b>第四章 FT 波谱仪的操作技术</b> .....	<b>69</b>
§ 4.1 FT 波谱仪的基本部件 .....	69
4.1.1 脉冲程序器 .....	69
4.1.2 射频功率放大器 .....	70
4.1.3 接收器 .....	71
4.1.4 场-频锁 .....	71
§ 4.2 FT 核磁共振的操作: 最佳参数的选择 .....	71
4.2.1 时域和频域 .....	71
4.2.2 脉冲间隔 .....	72
4.2.3 射频载波的位置 .....	72
4.2.4 倾角 .....	74
4.2.5 脉冲宽度 $P_n$ .....	74
4.2.6 总的扫描次数: 灵敏度的增强 .....	76
4.2.7 定量分析 .....	78
4.2.8 相位和强度异常与交变相位方法 .....	78
§ 4.3 数据系统 .....	80
4.3.1 中央处理机 (CPU) .....	80
4.3.2 存贮器 .....	80
4.3.3 性能指标 .....	81
4.3.4 计算机操作 .....	81

4.3.5	外围设备 .....	82
4.3.6	接口 .....	82
4.3.7	模-数 (A-D) 转换器 .....	82
§ 4.4	数据的采集 .....	83
4.4.1	采样 .....	83
4.4.2	模-数转换 .....	84
4.4.3	动态范围 .....	84
4.4.4	信号的平均 .....	86
4.4.5	正交 NMR .....	91
§ 4.5	Fourier 变换 .....	92
4.5.1	快速 Fourier 变换 (FFT) .....	92
4.5.2	折叠效应: 频率滤波 .....	93
§ 4.6	其它的数据处理步骤 .....	95
4.6.1	自由感应衰减信号的处理 .....	95
4.6.2	数据处理 .....	98
§ 4.7	FT 核磁共振实验的操作步骤 .....	100
4.7.1	波谱仪的调整 .....	100
4.7.2	数据系统的调整 .....	100
4.7.3	数据的采集 .....	102
4.7.4	信号的调节 .....	102
4.7.5	Fourier 变换 .....	103
4.7.6	相位的校准 .....	103
4.7.7	结果的输出 .....	103
§ 4.8	NMR 波谱学的展望 .....	103
4.8.1	随机 NMR .....	104
4.8.2	快速扫描 Fourier 变换 .....	104
4.8.3	二维 Fourier 变换波谱 .....	105
4.8.4	FT NMR 的选择性激发 .....	106
4.8.5	特定的激发方式 .....	107
4.8.6	固体高分辨核磁共振 .....	107
4.8.7	核磁共振成像 .....	108
	参考文献 .....	109
<b>第五章 样品制备技术</b> .....		<b>111</b>
§ 5.1	核磁共振样品管 .....	111
5.1.1	样品管 .....	111
5.1.2	样品管的清洗和样品回收 .....	113
5.1.3	装样 .....	114
5.1.4	脱气 .....	114
5.1.5	核磁共振样品管的密封 .....	116
5.1.6	样品管的旋转 .....	116
§ 5.2	溶剂 .....	116
§ 5.3	化学位移 .....	121

5.3.1	内标和外标 .....	121
5.3.2	频谱标定 .....	122
5.3.3	化学位移的绝对标度 .....	123
5.3.4	化学位移的相对标度 .....	124
§ 5.4	核磁共振试剂 .....	127
5.4.1	核磁共振非手性镧系位移试剂 .....	128
5.4.2	弛豫试剂 .....	130
5.4.3	手性溶剂和手性位移试剂 .....	130
5.4.4	使用化学试剂除氧和消除顺磁性杂质 .....	131
5.4.5	非镧系化合物的结构试剂 .....	133
	参考文献 .....	134
<b>第六章</b>	<b>多重照射实验</b> .....	<b>137</b>
§ 6.1	去偶实验 .....	138
6.1.1	去偶现象 .....	138
6.1.2	去偶实验中谱线频率和强度的变化 .....	139
6.1.3	使用相干射频场的同核或异核去偶 .....	139
6.1.4	FT 谱的同核去偶 .....	140
6.1.5	宽带去偶和随机噪声调制 .....	141
6.1.6	低功率宽带去偶和季碳的选择性观测 .....	142
§ 6.2	偏共振异核实验中的局部去偶 .....	143
6.2.1	弱偶合体系中的偏共振实验 .....	143
6.2.2	二级效应在偏共振实验中的应用 .....	146
6.2.3	应用偏共振实验校准 $B_1$ 场功率 .....	146
§ 6.3	选择性照射实验 .....	147
6.3.1	微扰实验 .....	148
6.3.2	广义 Overhauser 效应和 CW 谱的 INDOR 实验 .....	148
6.3.3	在 FT NMR 中的假 INDOR 实验 .....	151
§ 6.4	核的 Overhauser 效应的测量 .....	154
6.4.1	同核 Overhauser 效应的选择性测量 .....	155
6.4.2	在 FT 谱中异核 Overhauser 效应和门控去偶 .....	157
§ 6.5	具有 Overhauser 效应增强的偶合谱 .....	160
§ 6.6	在 FT 谱中应用双共振进行峰的消除 .....	160
	参考文献 .....	164
<b>第七章</b>	<b>弛豫时间测定</b> .....	<b>166</b>
§ 7.1	弛豫定律 .....	166
§ 7.2	弛豫时间 $T_1$ 的测量 .....	167
7.2.1	累进饱和 Fourier 变换法 (PSFT) .....	167
7.2.2	累进饱和法的改进 .....	172
7.2.3	反转恢复 Fourier 变换法 (IRFT) .....	173
7.2.4	反转恢复法的改进形式 .....	174
7.2.5	饱和和恢复 Fourier 变换法 (SRFT) .....	176

• x •

7.2.6	可变倾角法 (VNAFT)	177
7.2.7	单扫描法 (SSFT)	178
§ 7.3	$T_1$ 测量实验的注意事项和数据处理	180
7.3.1	样品制备和温度要求	180
7.3.2	波谱仪指标	181
7.3.3	数据处理	185
§ 7.4	在弛豫恢复技术基础上建立的峰消除方法	187
7.4.1	IRFT 脉冲序列的使用	187
7.4.2	PSFT 脉冲序列的使用	188
7.4.3	溶剂峰的选择性反转	189
§ 7.5	弛豫时间 $T_2$ 的测量	190
7.5.1	横向弛豫时间与磁场不均匀性的影响	190
7.5.2	横向弛豫时间 $T_2$ 的测量方法与未偶合体系	191
7.5.3	自旋-自旋偶合体系的 $T_2$ 测量	193
7.5.4	以噪声去偶方式测量 $T_2$	194
7.5.5	自旋锁定实验和 $T_{1\rho}$ 的测量	195
	参考文献	196
<b>第八章</b>	<b>动态核磁共振实验</b>	<b>198</b>
§ 8.1	用峰形变化实验测定平衡态交换体系的寿命	199
8.1.1	理论方面	199
8.1.2	布居不等的两位之间的交换	200
8.1.3	布居相等且假定峰宽也相等的两位交换 ( $T_{2A} = T_{2B}$ , $p_A = p_B = 1/2$ , $\tau_A = \tau_B = \tau$ )	202
8.1.4	峰宽相等且与 $(\nu_A - \nu_B)$ 相比可忽略不计的等布居两位交换 ( $T_{2A}^{-1} = T_{2B}^{-1} \ll \omega_A - \omega_B$ )	203
8.1.5	慢交换和快交换, 以及与稀释样的交换	204
8.1.6	无偶合或弱偶合体系中的多位交换	205
8.1.7	强偶合体系中的交换	210
8.1.8	质子之外核的寿命测量	211
8.1.9	寿命测量的精密度和准确度	212
§ 8.2	利用双照射实验对交换平衡体系中寿命和弛豫时间的同时测定	214
8.2.1	方法原理	214
8.2.2	方法的选择和实验说明	216
§ 8.3	平衡速度的测量	218
8.3.1	慢反应体系中的平衡速度测量	218
8.3.2	截流和连续流动核磁共振实验	220
§ 8.4	变温实验操作技术	224
8.4.1	气流和温度控制	224
8.4.2	温度测量	227
§ 8.5	由速度常数和温度测量确定活化参数	230
8.5.1	活化函数	230
8.5.2	活化参数计算	231

8.5.3 活化函数的精密度和准确度 .....	232
参考文献 .....	234
<b>第九章 强度测量和定量分析的实验方法</b> .....	<b>237</b>
§ 9.1 CW 谱灵敏度优化和强度测量 .....	237
§ 9.2 FT 谱灵敏度的优化 .....	238
9.2.1 应用于短横向弛豫时间情况的单脉冲方法 .....	238
9.2.2 应用于长本征横向弛豫时间情况的稳态单脉冲方法 .....	239
9.2.3 驱动平衡 Fourier 变换方法 ( $T_2^* \ll T_2 \leq T_1$ ) .....	241
§ 9.3 FT 谱的定量测定 .....	242
9.3.1 与待测自旋体系性质有关的一些问题 .....	242
9.3.2 波谱仪的最佳操作 .....	243
9.3.3 Fourier 变换定量测定方法 .....	244
9.3.4 作 FT( $^{13}\text{C}$ ) 定量分析的实验步骤 .....	245
§ 9.4 定量分析方法 .....	246
9.4.1 定量分析的常用技术 .....	246
9.4.2 样品制备 .....	247
9.4.3 信号强度数据处理 .....	248
9.4.4 各种类型的定量测定 .....	248
9.4.5 利用 NMR 参数权重平均值作定量分析 .....	252
参考文献 .....	253
<b>第十章 作为核磁共振助剂的化学试剂的使用</b> .....	<b>254</b>
§ 10.1 位移试剂和立体化学测定 .....	254
10.1.1 位移试剂的效用 .....	254
10.1.2 镧系诱导位移 (LIS) 机理解析 .....	255
10.1.3 键合位移的测定 .....	257
10.1.4 键合位移分析 .....	260
§ 10.2 手性试剂 .....	263
§ 10.3 弛豫试剂 .....	266
10.3.1 有助于谱线归属的峰加宽试剂 .....	268
10.3.2 顺磁性试剂和自旋去偶 .....	269
10.3.3 有选择地缩短纵向弛豫时间用来测定结构 .....	270
10.3.4 采用弛豫试剂节省长期平均实验的时间 .....	271
10.3.5 弛豫试剂和核的 Overhauser 效应的消除 .....	271
参考文献 .....	272
<b>附录</b> .....	<b>276</b>
1. 旋转坐标系中磁化强度矢量的运动和 Bloch 方程 .....	276
2. 核磁共振信号的理论推导 .....	277
3. 磁场的低频调制效应 .....	279
4. Bessel 函数 .....	281
5. 纵向弛豫时间和核的 Overhauser 效应有关数据 .....	282
6. 作图法和计算机辅助寿命测定 .....	294

符号和缩写词.....	304
7. NMR 文献.....	300
核磁共振数据.....	306
核磁共振常用单位.....	307
物理常数表.....	308
索引.....	309

# 第一章 基本概念

本书所叙述的是核磁共振 (NMR) 实践方面的有关内容。目前已经有许多著作广泛地描述了连续波或脉冲方法的理论原理 (参看附录 7)。为了帮助大家更好的理解实验方面的问题, 这里仍有必要简要地回顾一下核磁共振波谱学的基本原理和主要公式。

最近, 所谓 Fourier 变换的方法得到了迅速的发展, 并且已经成为一种常规的测试方法。起初这种技术与通常的连续波方法同时并存。但是在最新的商品核磁波谱仪中, 它已经趋于成为一种唯一的操作方式。对习惯于慢通过实验的化学家来说, 由于目前许多核磁共振谱仪功能的计算机化, Fourier 变换核磁共振方法在他们眼里似乎成了非常陌生的东西。但不管怎样, 核磁共振的基本原理是一样的。在叙述核磁共振现象时, 我们将连续波和脉冲 Fourier 变换这两种激发方法放在一起进行讨论。

## § 1.1 核磁共振现象

### 1.1.1 核的磁性质<sup>[1-3]</sup>

核具有角动量和磁矩, 它们的性质有些类似于电子的轨道角动量和本征磁矩。从量子力学观点看, 核角动量在任何方向的分量可以取值  $m\hbar$ , 这里的  $\hbar$  是 Planck 常数除以  $2\pi$ , 而  $m$  是自旋变量,  $m$  值是不连续的, 其变化范围为  $2I + 1$ , 即

$$m = -I, -(I-1), \dots, (I-1), I \quad (1.1)$$

$I$  是自旋量子数, 其值因核而异, 因此, 核角动量的最大观察分量为

$$P_{\max} = \hbar I \quad (1.2)$$

若原子质量数  $A$  为奇数, 则自旋量子数  $I$  为半整数, [ $^1\text{H}(1/2)$ ,  $^{14}\text{N}(1/2)$ ,  $^{17}\text{O}(5/2)$ ]. 如果  $A$  是偶数而原子序数  $Z$  是奇数,  $I$  为整数, [ $^2\text{H}(1)$ ,  $^{15}\text{N}(1)$ ,  $^{10}\text{B}(3/2)$ ]. 当  $A$  和  $Z$  均为偶数时,  $I$  则为零 ( $^{12}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$ ...).

自旋量子数不为零的核同样具有磁矩  $\mu$ ,  $\mu$  正比于自旋角动量  $\mathbf{P}$

$$\mu = \gamma \mathbf{P} \quad (1.3)$$

磁旋比  $\gamma$  足以表现核的特征,  $\gamma$  值可以是正值也可以是负值。表 1.1 和表 1.2 给出了核磁矩的典型数值。

自旋量子数  $I$  大于  $1/2$  的核还具有电子四极矩  $Q_e$ 。  $Q_e$  是由核电荷分布的非球形对称所引起 (表 1.1 和表 1.2)。

尤其是在脉冲实验中, 需要经常应用经典力学定律来描述核运动, 此时请不要忘记核自旋的量子化性质。当存在磁感应场  $\mathbf{B}_0$  时, 磁矩发生扭转, 力矩为  $\mu$  和  $\mathbf{B}_0$  的矢量积, 即  $\mu \wedge \mathbf{B}_0$ 。根据 Newton 运动定律, 力矩等于角动量的变化速率

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = \mu \wedge \mathbf{B}_0 \quad (1.4)$$

方程(1.3)把  $\mathbf{P}$  和  $\mu$  联系起来, 由此我们得到运动的方程

$$\frac{d\mu}{dt} = \gamma \mu \wedge \mathbf{B}_0 \quad (1.5)$$

表 1.1 A 族元素的核性质

	IA		IIA		IIIA		IVA	
元素	Li		Be		B		C	
同位素	6	7	9		10	11	13	
<i>I</i>	1	3/2	3/2		3	3/2	1/2	
NA	7.43	92.57	100		18.83	81.17	1.108	
$\nu_0$	6.265	16.547	5.983		4.575	13.660	10.705	
$\mu$	0.82192	3.2560	-1.1773		1.8005	2.6880	0.70220	
$Q_e$	$4.6 \times 10^{-4}$	-0.1	0.02		0.074	0.035		
RS	$8.5 \times 10^{-3}$	0.294	0.014		0.02	0.165	0.016	
元素	Na		Mg		Al		Si	
同位素	23		25		27		29	
<i>I</i>	3/2		5/2		5/2		1/2	
NA	100		10.05		100		4.7	
$\nu_0$	11.262		2.606		11.094		8.458	
$\mu$	2.2161		-0.85471		3.6385		-0.55477	
$Q_e$	0.1		(a)		0.149			
RS	0.093		0.027		0.207		0.078	
元素	K		Ca		Ga		Ge	
同位素	39	41	43		69	71	73	
<i>I</i>	3/2	3/2	7/2		3/2	3/2	9/2	
NA	93.08	6.91	0.13		60.2	39.8	7.61	
$\nu_0$	1.987	1.092	2.865		10.219	12.984	1.485	
$\mu$	0.39094	0.21488	-1.3153		2.0108	2.5549	-0.87677	
$Q_e$	-0.07	a	a		0.178	0.112	-0.2	
RS	$5 \times 10^{-4}$	$8.4 \times 10^{-3}$	0.064		0.069	0.142	$1.4 \times 10^{-3}$	
元素	Rb		Sr		In		Sn	
同位素	85	87	87		113		117	119
<i>I</i>	5/2	3/2	9/2		9/2		1/2	1/2
NA	72.8	27.2	7.02		4.16		7.67	8.68
$\nu_0$	4.111	13.932	1.845		9.310		15.17	15.87
$\mu$	1.3482	2.7414	-1.0893		5.4960		-0.9949	-1.0409
$Q_e$	0.28	0.14	(a)		0.75			
RS	0.01	0.18	$2.7 \times 10^{-3}$		0.345		0.045	0.052
元素	Cs		Ba		Tl		Pb	
同位素	133		135	137	203	205	207	
<i>I</i>	7/2		3/2	3/2	1/2	1/2	1/2	
NA	100		6.59	11.32	29.52	70.48	21.11	
$\nu_0$	5.585		4.230	4.732	24.33	24.57	8.899	
$\mu$	2.5642		0.83229	0.93107	1.5960	1.6115	0.5837	
$Q_e$	0.004		a	a				
RS	0.047		$4.8 \times 10^{-3}$	$6.8 \times 10^{-3}$	0.19	0.19	$9.1 \times 10^{-3}$	

a 没有数据。

*I* 为核自旋量子数, NA 为天然丰度的百分数,  $\nu_0$  为 1T 磁场下的核磁共振频率 (MHz)。磁矩  $\mu$  定义为  $\mu$  的最大可观察分量, 单位是核磁子  $\mu_B$ ,  $\mu_B = 5.0505 \times 10^{-27} \text{JT}^{-1}$ 。  $Q_e$  为电子四极矩, 单位是  $\text{c} \times 10^{-28} \text{m}^2$ 。 RS 为恒定磁场下, 同样数目的核的相对灵敏度。表右下方的数据为氫原子同位素的数值。



(引自 Varian NMR 表)

VA		VIA	VIIA		稀有气体
N		O	F		Ne
14	15	17	19		21
1	1/2	5/2	1/2		3/2
99.635	0.365	0.037	100		0.257
3.076	4.315	5.772	40.055		3.363
0.40358	-0.28304	-1.8930	2.6273		-0.66176
0.071		$-4 \times 10^{-3}$			(a)
$1 \times 10^{-3}$	$1 \times 10^{-3}$	0.029	0.834		0.027
P		S	Cl		
31		33	35	37	
1/2		3/2	3/2	3/2	
100		0.74	75.4	24.6	
17.236		3.266	4.172	3.472	
1.1305		0.64274	0.82091	0.68330	
		-0.053	-0.079	-0.062	
0.066		$2.3 \times 10^{-3}$	$4.7 \times 10^{-3}$	$2.7 \times 10^{-3}$	
As		Se	Br		Kr
75		77	79	81	83
3/2		1/2	3/2	3/2	9/2
100		7.50	50.57	49.43	11.55
7.292		8.131	10.667	11.499	1.64
1.4349		0.5325	2.0991	2.2626	-0.96705
0.5			0.34	0.28	0.15
0.025		$7 \times 10^{-3}$	0.079	0.098	$1.9 \times 10^{-3}$
Sb		Te	I		Xe
121	123	123	127	129	131
5/2	7/2	1/2	5/2	1/2	3/2
57.25	42.75	0.89	100	26.24	21.24
10.19	5.518	11.16	8.519	11.78	3.490
3.3417	2.5334	-0.7319	2.7937	-0.77255	0.68680
0.53	0.68	-0.8824	-0.75		-0.12
0.16	0.046	0.018	0.093	0.021	$2.8 \times 10^{-3}$
Bi					
209					
9/2					
100					
6.842					
4.0389					
-0.4					
0.14					

	$^1\text{H}$	$^2\text{H}$	$^3\text{H}$
<i>I</i>	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$
NA	99.985	0.015	放射性元素
$\nu_0$	42.576	6.536	45.414
$\mu$	2.79268	0.85738	2.9788
$Q_c$	—	0.00277	—
RS	1	0.0096	1.21