

ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	1. 分子分光学および分子集合体の構造
中項目	1-4. 磁気共鳴
小項目	1-4-5. 超高分解能NMRの開発

概要（200字以内）

NMR 装置の高磁場化は、測定感度とスペクトル分解能の向上をもたらすとともに、分子配向や緩和現象に影響を与えることを通じて、物質構造に関する新規な情報をもたらすことが期待されている。現在 900MHz を越える超高磁場 NMR 装置（図 1）が国内で稼動しており、ライフサイエンス、マテリアルサイエンス等の分野で成果を挙げつつある。今後、高温超伝導線材を用いたさらなる超高磁場 NMR 装置の実現が期待される。



図 1 分子科学研究所において稼動している 920MHz NMR 分光器

現状と最前線

NMR 法は、物質科学のさまざまな分野で必要不可欠な計測手段となっている。NMR 装置の高磁場化は、感度上昇をもたらすだけでなく、分解能の向上、残余磁気双極子相互作用の観測、TROSY 効果、四極子核の観測などにおいてさまざまなメリットをもたらすことから、その開発に大きな期待が寄せられている。例えば、ライフサイエンスの分野においては、タンパク質の活性中心に位置している酸素や金属イオンの計測が可能になると、その機能発現メカニズムの理解につながり、薬剤のデザインに対して有用な情報をもたらす。また、マテリアルサイエンスの分野においては、アルミニウムや酸素の計測により、固体触媒の高機能化やナノ材料開発の促進が期待される。

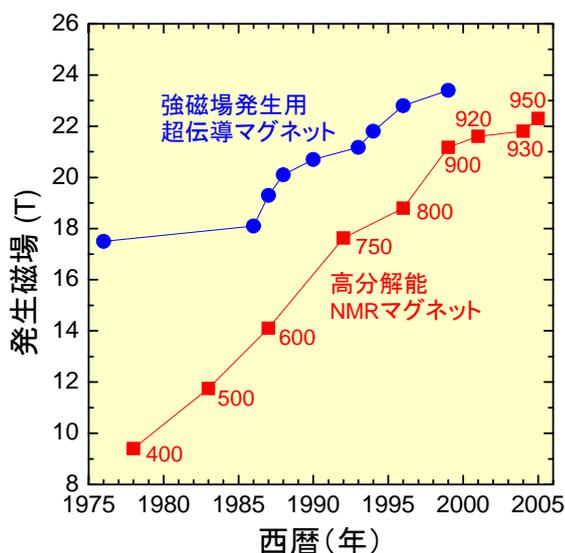


図 2 発生磁場の推移

現在、海外において 950MHz の超高磁場 NMR 装置 (22.3T) がすでに実用段階となっており、国内においては物質・材料研究機構において 930MHz (固体) および 920MHz (溶液) の NMR 装置が、分子科学研究所において 920MHz の装置 (固体と溶液) が最高磁場の装置として稼働している (図 2)。

NMR 測定のパルスシーケンスの開発、NMR スペクトルの解析技術の進展により、分子量の比較的小さな生体高分子の立体構造を決定する方法論はほぼ確立したといえる。しかしながら、膜タンパク質、高分子量タンパク質、糖タンパク質、変性タンパク質など、これまでの方法で構造解析が困難であるタンパク質については、高磁場 NMR 装置のもたらす特性を活かした高分解能のスペクトル計測 (高分解能測定、TROSY 法) が威力を発揮する。また、超高磁場条件下における緩和解析や化学交換の解析を通じて、従来カバーすることが困難であった時間域における高分子の動的性質に関して有益な情報をもたらされるものと期待される。

このような状況を踏まえて、さらなる超高磁場 NMR 装置の開発が計画されている。しかしながら、現在普及している低温超伝導線材を用いた装置は、線材の磁場特性に制限され、実用レベルでは、22.3T ( $^1\text{H}$  の共鳴周波数が 950MHz) の磁場強度を実現することが限界である。一方、低温超伝導線材の代替として、電磁石を用いて 30T 級の強磁場を発生させることは可能であり、 $^{51}\text{V}$  や  $^{115}\text{In}$  などの NMR についてはすでに国内において実績をもつ。しかしながら、消費電力、電源の揺らぎに由来する磁場の揺らぎ、設備コスト、設置スペース等の問題から、実用的な NMR として普及されるためにはさらなる検討が必要である。

30T 級の超高磁場 NMR 装置の開発においては、磁場特性が優れた高温超伝導線材の開発が重要であると考えられている。同時に 30T 級の超伝導磁石においては、磁場安定化の制御システムが必要となる。しかしながら、現時点では磁場のドリフトが 10Hz/h 以下を満たすには技術的なハードルが高い。このため、NMR 用の超伝導コイルでは、外部から磁石電流を供給するなどの様々な工夫が検討され始めている。

(参考文献) T. Kiyoshi et al, *Fusion Engineering and Design* **81**, 2411–2415 (2006)

#### 将来予測と方向性

・ 5 年後までに解決・実現が望まれる課題

電源の揺らぎに由来する磁場の揺らぎを制御する技術を開発し、電磁石を用いたハイブリッド磁石による 30T 級の強磁場 NMR 装置の実用化が望まれる。

・ 10 年後までに解決・実現が望まれる課題

磁場特性が優れた高温超伝導線材を用いた超高磁場 NMR 装置と磁場安定化システムの開発によってもたらされる 30T 級の強磁場 NMR 装置を利用した超高分解能スペクトル計測の実現。

#### キーワード

超高磁場 NMR、高分解能 NMR、高温超伝導線材、残余磁気双極子相互作用、四極子核、TROSY

(執筆者: 加藤 晃一)