

## 核磁気共鳴装置 (AVANCE300, 500, 500T)

科学分析支援センター 藤原 隆司

昭和 63 年にセンターに設置され、長年にわたって数多くのユーザーの研究を支えてきた Bruker 社の DPX400(元 AM400), 平成 5 年に導入された DPX200(元 AC200)および平成 8 年に移設された AC300P(製造は昭和 63 年)の 3 台の核磁気共鳴装置(以下 NMR 装置と略する)は平成 21 年度の補正予算によってそれぞれ更新された。新規に導入された NMR 装置はブルカー・バイオスピン社製の AVANCE300 が一台と AVANCE500 が二台である。このうち, AVANCE300, 500(以下 AV300, AV500 と記す)については理工学研究科で採択され, 科学分析支援センターに移管設置されたものである。もう一台の AVANCE500については後述の分光器の仕様の違い等から混乱を避けるためにセンターでは AVANCE500T(以下 AV500T と記す)と呼ぶこととしている。

今回導入された分光計は AVANCE IIIタイプのデジタル分光計であり, 従来の分光器に比べて安定した測定が可能なデジタルロック, 高ダイナミックレンジ, 高デジタル分解能を実現した最新型である。また AV300 の分光器は NanoBay と呼ばれる超小型の分光器である。これは AV500, AV500T に用いられている従来の One-Bay タイプに比べて非常にコンパクトなサイズになっている。いずれの超電導磁石も自己遮蔽マグネットと呼ばれる, 漏洩磁場をキャンセルする磁場をかける構造になっており, 現有の DRX400 のノンシールドマグネットに比べて漏洩磁場は非常に小さくなっている。AV500T は三重共鳴が可能な仕様になっており(Tは Triple Resonance の Tである), プローブもそれに対応したプローブ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{15}\text{N}$ )が用意されている。本装置に装着されている溶液用多核プローブは数十種類の核種がプローブ交換をすることなく測定することが可能なものであり, 共鳴周波数のチューニングも自動化されており, 多核種測定が非常に容易になっている。また,  $^{19}\text{F}$  核の測定についてはこのプローブのまま測定が可能となり,  $^{19}\text{F}$  NMR の測定が容易になった。また, AV500T には固体プローブが用意されているが, 通常は溶液用多核プローブが装着されており, 固体測定には特別測定申請があった場合, 一ヶ月のうちに決まった週に優先して測定できるように NMR 専門委員会によって運用方法が決められている。測定・解析プログラムは専用の Topspin Ver.2 である(DRX400は Topspin Ver.1)。このバージョンから Topshim というシム調整をするルーチンが標準で組み込まれており, 通常の試料であれば従来の手動でのシム調整に比べて高次の軸の調整も自動で行われるので, 非常に楽になった。比較のため, アルカロイドの一種であるキニーネ(Quinine)をそれぞれの装置で測定した NMR スペクトルを図示した。スペクトルの

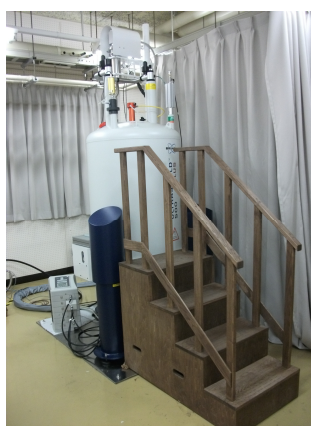
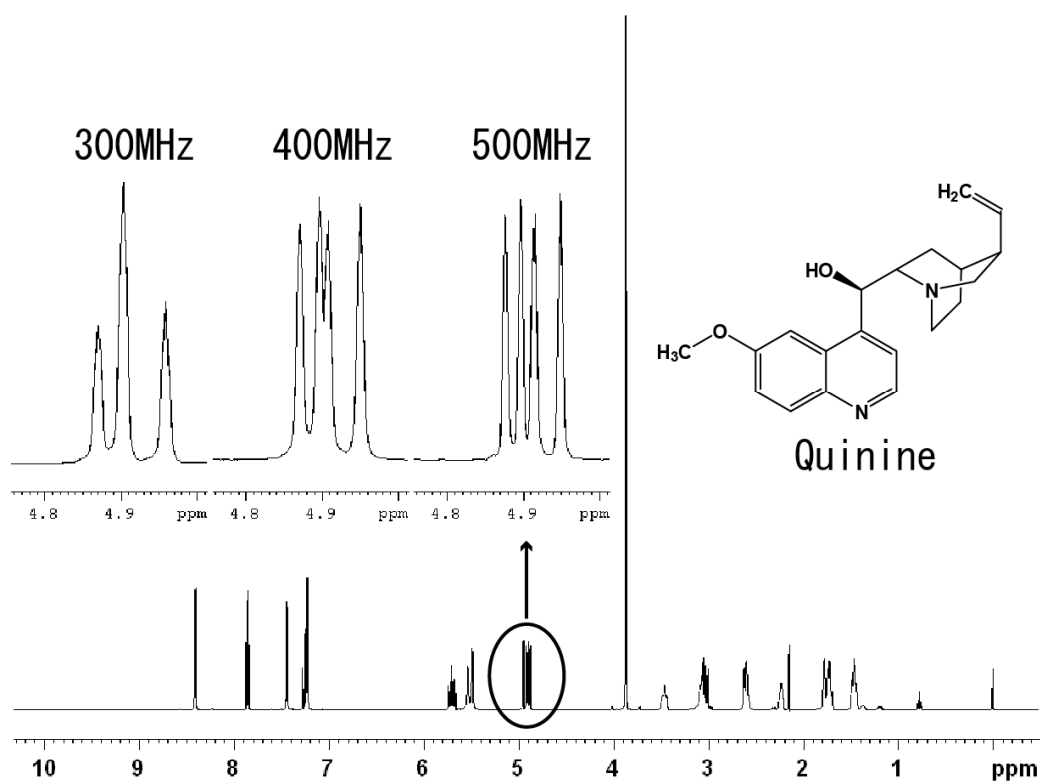


図. 上から AV300, AV500, AV500T

一部を見れば分かるように磁場が大きくなるほど重なり合っていたシグナルの分離が見られる. DRX400はクライオプローブによって劇的な感度の向上が実現されたが磁場の大きさは 400 MHz のままであるの  
で, 今回導入された 500 MHz のマグネットによる分解能の向上は複雑な有機分子の構造解析を行う上で有益なことである.

最後に, NMR は利用者数の非常に多い装置であるが, 従来機種は利用者の皆様のご協力もあって, 大きなトラブルもなく利用されてきた. 新しい装置についても, 未永く使用するために利用者の皆様のご理解とご協力をお願いしたい.



磁場の大きさとスペクトル分解能の比較( $^1\text{H}$  NMR, Quinine/ $\text{CDCl}_3$ )