

Bruker DRX400 紹介

理学部基礎化学科 藤原 隆司

平成4年にセンターに設置され、多くのユーザーに利用されてきた Bruker 社の ARX400 核磁気共鳴分光装置は、平成14年12月に超伝導マグネットはそのままに、分光計やコントロール用のコンピュータ・プローブなどを更新して新たに DRX400 として生まれ変わった。本稿はその DRX400 の特徴などについて簡単に紹介する。

測定をするためのパルスの制御や信号の取り込みなどを行う分光計は ARX にくらべて大幅にデジタル化されている。それによって発生するパルスを高速・高精度に制御することが可能になり、複雑なパルスプログラムを実行できるようになった。また従来のアナログ回路に比べてパルスの位相・周波数・強度の変調などはデジタル回路中での数値演算で行われているため、電気回路素子の誤差や温度の影響を受けない。このような最新の電気回路技術によってスペクトルの精度、感度が ARX400 や AM400 よりも向上することが期待される。

現在は標準でグラジエントプローブ(試料管外径は 5 mm)がマグネットに装着されている。このプローブによってグラジエントパルスを用いることが可能となる。一時的にサンプルのある場所の磁場を乱すことを「グラジエントをかける」といい、磁場を乱す時間や大きさを制御したパルスプログラムを用いる。このグラジエントパルスを用いることで、通常の COSY 測定では原理上積算回数は最低4回必要で4の倍数回が必要となるが、グラジエントパルスを使う COSY 測定では位相回しは不要となり、積算回数1回の測定が可能となるため従来法に比べて飛躍的に測定時間が短縮される。また、パルス磁場勾配スピンエコー法はこのグラジエントプローブを用いることで可能となる測定法であり、拡散係数(簡単に言えば分子の拡散していく速さ)の測定に大きな威力を発揮する。このため、従来の有機化合物などの構造決定に用いられるだけでなく、分子の溶存状態を解析するような研究にもこの分光器を用いることが可能であり、物理化学的な研究の強力なツールとして利用されることも DRX400 の新たな使命の一つであると言える。このプローブのもう一つの特徴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ことである。共鳴周波数のチューニングもかなり自動化されており、多核種測定が非常に容易になり、多様な(NMR測定可能な)元素を扱う研究者にとって多核種測定が非常に敷居の低くなった感がある。測定可能なすべての核種についての標準パラメータの設定はなされていないが、ユーザーが実際に測定する核種について徐々に標準パラメータ設定を行っている。また固体測定用の分光ユニットも用意されており固体用のプローブを接続すれば測定可能である。

測定・解析プログラムは X ウィンドウ上で動作する XWINNMR となり、他の機種(AC200, AM400 など)にデータ処理用として接続されている Microsoft Windows で動作する WINNMR と画面構成などが似ているため、WINNMR に慣れていればそれほど操作感覚はかわらないのではないと思われる。またソフト・OSともに安定性が増しており、測定中ハングアップしたりすることは ARX 時代より減っている(ただバグが多少あるようで、XWINNMR が時折不安定な動作をすることがあるが)。また制御用コンピュータが SGI の O2 になり、OS が IRIX になったことでメンテナンスを行う側にとっても扱いやすくなった(ARX の OS は UNIX であったが、Bruker の特殊仕様であったのか通常の UNIX とは部分的に異なり、扱いづらいという印象があった)。

以上に紹介したように、今後この装置の特徴を生かした特殊測定の利用が増えるに伴って保存された測定データの容量が飛躍的に増加していくことが予想される。そのためデータの管理方法が問題となってくるが、データの管理・保存のためのファイルサーバを併設し、対処することを計画している(現在ファイルサーバの立ち上げ中である)。