

プロジェクト名(タイトル):

## 生命分子の実験的制限付き構造決定

利用者氏名:山崎俊夫(1)

理研における所属研究室名:

(1) 生命機能科学研究センター次世代マグネット開発連携ユニット

## 1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

核磁気共鳴(NMR)から得られる生体分子の各原子まわりの情報は生体分子の構造やそのダイナミクスと機能の関係を解明するうえで有用である。特に、結晶化できない柔らかい状態、動きのある状態での解析には NMR は不可欠である。もっとも基本的な各原子の情報は化学シフト(chemical shift)と呼ばれる、共鳴信号の周波数の主磁場に対する比である。構造依存性があるので、仮定した構造の妥当性を調べることに使われる。

NMR に使われる HTS(高温超電導体)磁石の磁場解析を補助的に行った。Tape 状導体が遮蔽電流を面内に流すので、磁場が歪む。quench などの磁場変動時に発熱の原因になり、quench 伝播の計算にも必要である。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

quantum espresso の package を使って、構造から電子分布を求める。Density functional theory と plane wave による展開を使うことによって、比較的大きな分子での計算が可能になっている。gipaw (gauge including projector augmented waves)法により NMR 化学シフトを計算した。

低分子結晶の場合と、タンパク質を分割した場合の計算を進めている。

磁場解析 program は自力開発である。電流と磁場の方程式に基づいて、時間変化を求めることができた。クエンチ過程での電流変化を与えた場合の渦電流由来の発熱計算を行った。Coil の中では、tape が重なっているので、お互いに協力して磁場の変化を抑制するので、磁場変化による発熱は小さくなる。しかし、coil の上端などに tape 線材が単独で存在しているところが危険になる。

## 3. 結果

低分子結晶中、水素結合ネットワークがある場合、水素の位置はあいまいな場合がある。水素位置の違う構造を Tautomer という。構造を仮定して化学シフト計算を計算したものと、実験結果を比べることが有用だった。

HTS 磁石の設計で、コイル本体だけでなく、リードも磁場変化による温度上昇がある。磁場をはじく現象の影響で、コイルの外近傍で HTS tape を貫く方向の磁場が強くなる。リードの方が常伝導化の危険が高い。磁場上昇時は危険なので、ゆっくり変化させるべきである。LTS quench で磁場が下がる時は、履歴効果で、危険度は低くなる。危険度が上がる原因と下がる原因があることが分かった。

## 4. まとめ

HTS 磁石の設計にとっても重要な役割を果たした。

## 5. 今後の計画・展望

HTS 磁石の磁場解析の高性能化を行いたい。非線形性と不安定性について、理解を進めたい。設計のためには、電磁力に対する力学的解析との組み合わせを考えたい。