

課題名(タイトル):

核磁気共鳴と磁石のシミュレーション

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. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係
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。

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。

2. 具体的な利用内容、計算方法

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。

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。

3. 結果

世界最高磁場 NMR を目指すマグネット設計に simulation 結果を用いた。コイル軸長を調整することで、REBCO 焼損の危険性を軽減することができた。

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

いろいろなサイズと形状のマグネットに応用を広げ、従来の NMR より小さいマグネットの開発や、違うサイズの別用途のマグネット開発につなげたい。

NMR 化学シフトと構造運動性の関係を利用した解析を進めたい。