

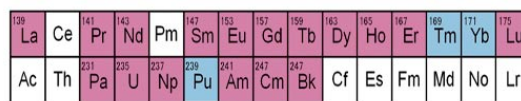
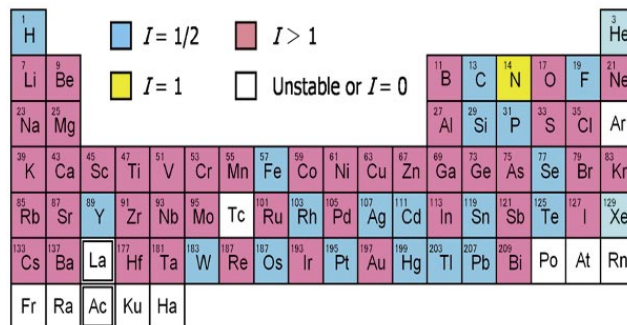
研究目的と概要 Mission and Outline

当グループの研究目的は、NMRの原理(Principles)および装置(Instruments)の開発と、それを材料分析に应用(Applications)して新しい材料の開発に貢献する知見を得ることの3点セット(PIA)です。特に、NIMSが開発済みの世界屈指の強磁場磁石群(930 MHz磁石、40 T級ハイブリッド磁石等)の特徴を活かした強磁場固体NMRシステムの開発と応用を実施しています。

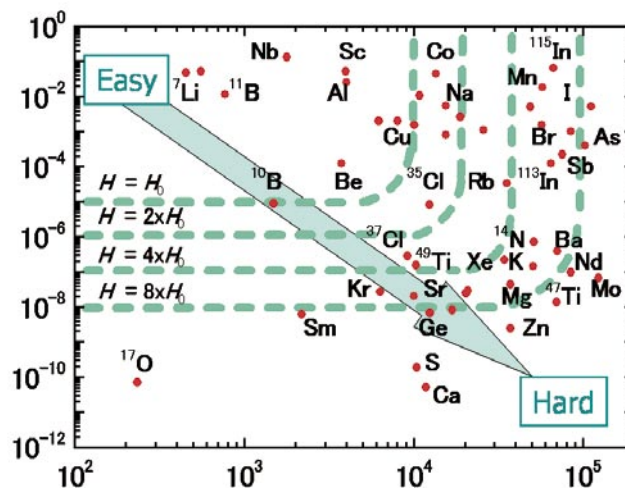
NMR(核磁気共鳴法)の利点は、たとえ非晶質物質や混合物であっても、その材料の機能発現部位をナノレベルで選択的に計測し、3次元化学構造とその動的性質をピンポイントで解明できることです。従来のNMRが貢献してきた主要分野は薬品開発です。そこでは溶液状態での測定が必須で、しかも、感度と分解能の面で特別に有利な水素と炭素だけに利用が限定されていました。

水素と炭素以外の元素でも高感度と高分解能を実現させるためには、20T以上の強磁場が不可欠です。特に、(A)の赤色で示した元素は、四極子核(核スピン量子数 I が1よりも大きい)と呼ばれ、強磁場が分解能を向上させるための唯一の手段です。従来は観測困難だったこれらの元素も強磁場によって初めて観測可能になります。その様子を(B)の青い等高線によって示します。この図では磁場の絶対値には必ずしも意味がないため、基準になる磁場 H_0 (大きさは任意)との相対値によって強磁場の効果を示します。

Our mission is developments of innovative NMR instruments especially taking advantage of high magnetic field (including 930 MHz and 40 T class hybrid magnet installed in NIMS), and expanding the horizon of NMR application by high field NMR to problems beyond the capacity of traditional NMR. Our goal is offering nanoscopic evidence by high field NMR to lead developments of innovative materials.



(A)



(B)

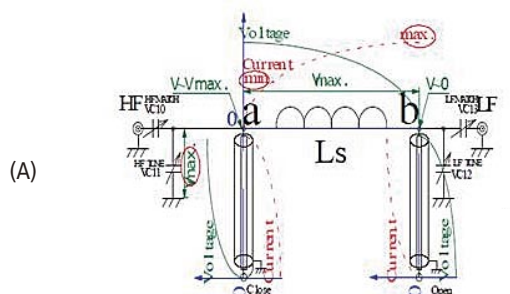
90%の元素がNMR可能((A)周期律表の青・黄・赤)だが、従来はH、Cなど一部に限定。75%のNMR可能核種は四極子核((A)図中の赤)であり、高磁場によってのみ分析が可能となる。(B)の青い等高線は、NMRの分析可能範囲が強磁場ほど増大する様子を示している。

90% elements are NMR active, but only H and C have been available so far. 75% of NMR active nuclei are quadrupolar (the reds in the periodic table), for which only high field can make NMR possible. The right panel shows how the higher field improves better NMR at quadrupolar nuclei.

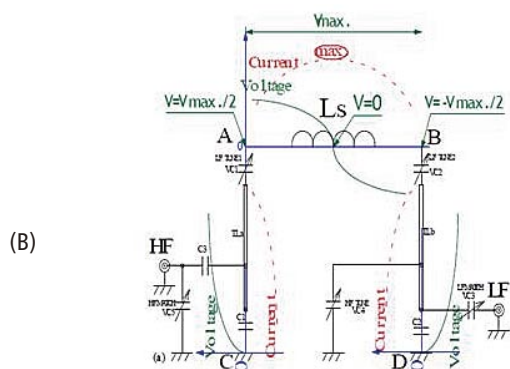
研究トピックス Research Topics

機器開発の成果：平衡共振回路を採用して試作した最初の930MHz 固体用プローブ。(A)は従来型。(B)が今回開発したプローブに用いた平衡共振回路で、コイルやコンデンサ両端電圧(緑実線)が従来の半分に抑えられ、耐電圧が上がる一方で、電流(赤点線)はコイル中心で最大となる理想状態が実現できる。写真の赤矢印が平衡共振回路のトランスミッションライン(金メッキした銅製の円筒フレーム)。平衡共振回路の採用によりナローボアであっても、従来型(ワイドボア)以上の高性能を発揮できる。例えば従来よりも高耐電圧、高感度、高分解能となる。

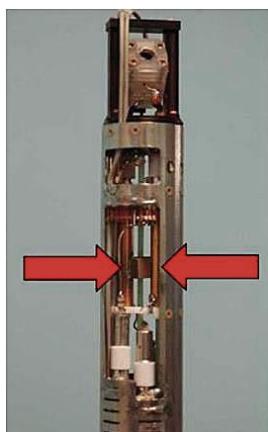
A balanced circuit double-tuned solid NMR probe was developed for ultra high field narrow-bore(NB)magnet. We built this probe and tested the fundamental performance using world highest NMR magnet at NIMS and 930MHz NMR system.



Schematic for the unbalanced double-tuned probe circuit using quarter-wave coaxial resonator. Voltage and current for HF resonance.

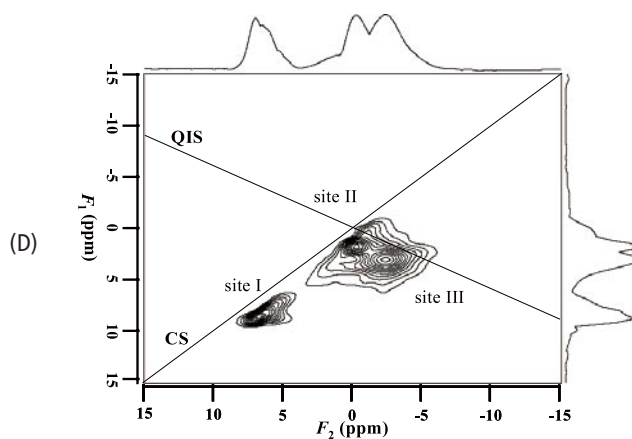
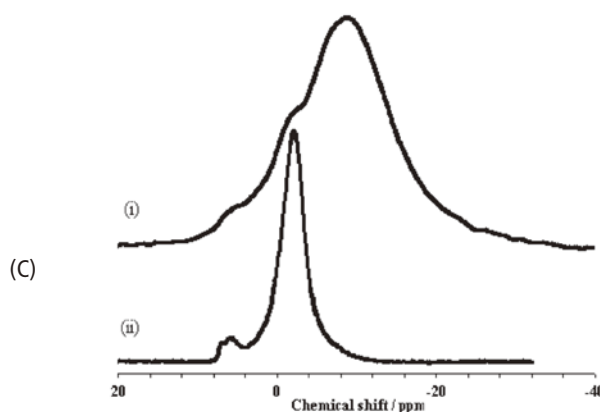


Schematic for the balanced double-tuned probe circuit using quarter-wave two-wire resonator.



材料分析への応用：Naで中和された Poly(ethylene-ran-methacrylic acid) アイオノマー中の Na イオンの会合構造について強磁場を用いた ^{23}Na MAS NMR(C) 及び ^{23}Na MQMAS NMR 法 (D) により調べた。Na イオンの異なる三種類の状態である孤立イオン、水和状態、会合体のそれぞれについて ^{23}Na MQMAS NMR 法により、等方的化学シフトと四重極関連項を求めることができた。このことから、強磁場中の MQMAS は、四極子の局所構造を求めるのに有力な手法であることが明らかとなった。[Y.Yamamoto, et.al., Chem.Lett. 35 (2006) 1058.]

A local structure of sodium ions in poly (ethylene-ran-methacrylic acid) ionomer neutralized by sodium has been investigated using ^{23}Na MAS and multiple-quantum-magic-angle-spinning (MQMAS) NMR techniques at high magnetic field. The isotropic chemical shifts and quadrupolar products of three different ^{23}Na ions, such as isolated, hydrated and aggregated ^{23}Na ions were estimated from peak position in ^{23}Na MQMAS spectrum. MQMAS technique at high magnetic field is powerful tool to investigate the local structure with respect to quadrupole nuclei.



主要装置 Main Instruments

930 MHz High Resolution Solid-state NMR system:

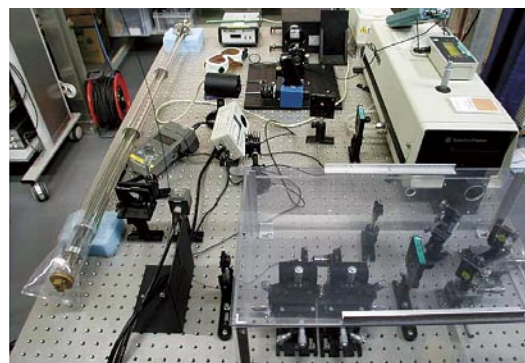
the magnet (left), the probes (center), CPMAS probe(right)
JEOL ECA-930 console,
Power amplifier HF500W, LF2kW,
CPMAS, MQMAS, HXY-MAS, MAS 20 kHz,
H, B, Al, O, C, Mg, etc.



その他の装置

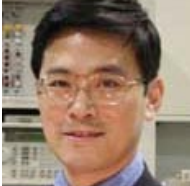
Other Instruments

JEOL ECA-500WB: HXY-MAS, MQMAS, MAS 20 kHz, VT
Bruker DSX-400WB: CPMAS, 6 kHz, VT
Broad-band NMR: 2 – 500 K, 2 – 500 MHz
OP-NMR (Ti:Sa Laser) : 700 – 1000 nm, 3 W
Machine shop



グループ構成員 Group Members

グループリーダー / Group Leader



清水 禎 / *Tadashi SHIMIZU*
Group Leader
Tel. +81-(0)29-863-5509
Fax. +81-(0)29-863-5571
E-mail: SHIMIZU.Tadashi@nims.go.jp

研究フェロー / Research Fellows

品川 秀行 / *Hideyuki SHINAGAWA*
特別研究員 / *Researcher*

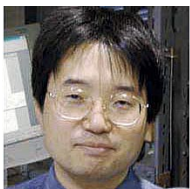
村上 美和 / *Miwa MURAKAMI*
NIMSポスドク研究員 / *Postdoctoral Fellow*

山田 和彦 / *Kazuhiko YAMADA*
NIMSポスドク研究員 / *Postdoctoral Fellow*

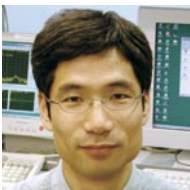
定年制研究員 / Permanent Researchers



丹所 正孝 / *Masataka TANSHO*
主幹研究員 / *Senior Researcher*
E-mail: TANSHO.Masataka@nims.go.jp



後藤 敦 / *Atsushi GOTO*
主幹研究員 / *Senior Researcher*
E-mail: GOTO.Atsushi@nims.go.jp



端 健二郎 / *Kenjiro HASHI*
主任研究員 / *Senior Researcher*
E-mail: HASHI.Kenjiro@nims.go.jp

技術スタッフ / Technical Assistants

大木 忍 / *Shinobu OHKI*
研究業務員 / *Technical Assistant*

出口 健三 / *Kenzo DEGUCHI*
研究業務員 / *Technical Assistant*

事務スタッフ / Office Assistants

中山 幸枝 / *Yukie NAKAYAMA*
事務業務員 / *Office Assistant*

オフィス
Location of Leader's Office

桜地区 管理・研究棟3F 308室
Room 308, Central Office 3F, Sakura Site

グループウェブサイト
Group Website

<http://www.nims.go.jp/ancc/index.html>

外部競争的資金プロジェクト External Competitive Research Funds

日本学術振興会科学研究費補助金
Grant-in-Aid for Scientific Research (JSPS, Japan)

JST戦略的創造研究推進事業さきがけ
PRESTO (JSPS, Japan)

文部科学省 NIMSナノテクノロジー拠点
NIMS Nanotechnology Support Network (MEXT, Japan)

池谷科学技術財団 研究助成金
Grant-in-Aid for Scientific Research by the Iketani Fundation