

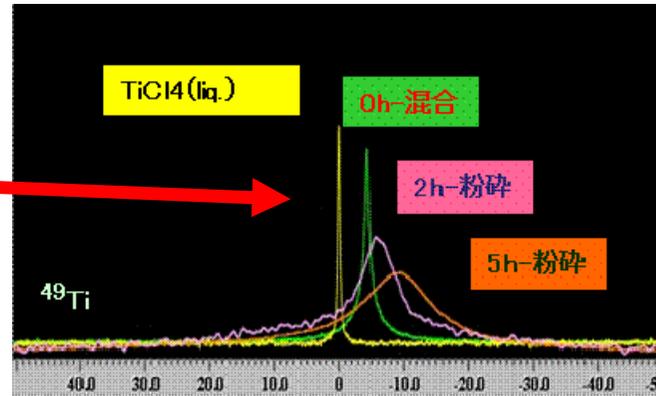
強磁場ステーション

930MHz固体高分解能NMRシステム

桜

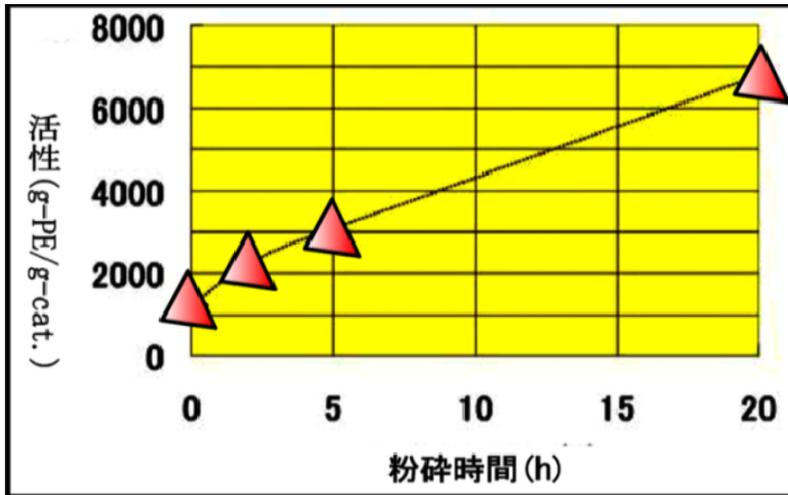
試料: チタン元素

触媒活性が高い試料ほど、チタンの運動が遅くなっていることを示唆している。



事例:
930MHz固体NMRによるオレフィン重合触媒の構造解析

概要:
60年間、触媒構造が謎に包まれていたオレフィン重合触媒において、触媒活性点と予想されているチタン元素のNMR信号を世界で初めて観測した



オレフィン重合触媒において世界で初めて観測に成功したチタン元素のNMR信号。縦軸はNMR信号強度、横軸は基準値から計ったチタンNMR信号のエネルギー。

横軸はオレフィン重合触媒の原料である塩化マグネシウムと四塩化チタンを粉碎合成していた時間。縦軸はその触媒を用いて重合できたポリエチレンの生成量。



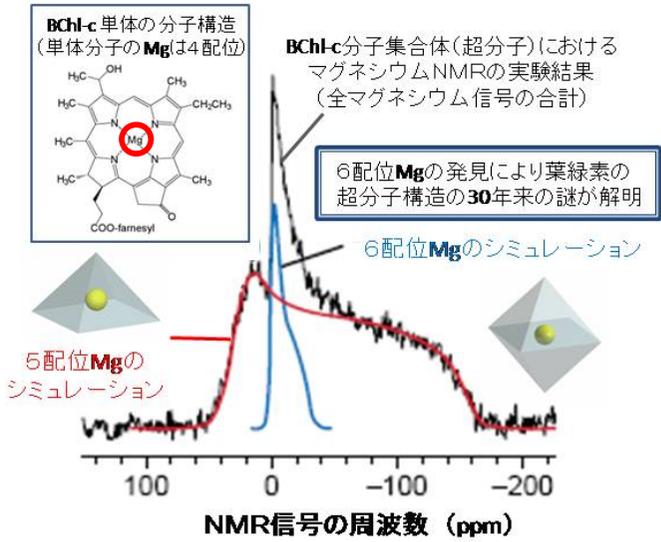
強磁場ステーション

930MHz固体高分解能NMRシステム

桜

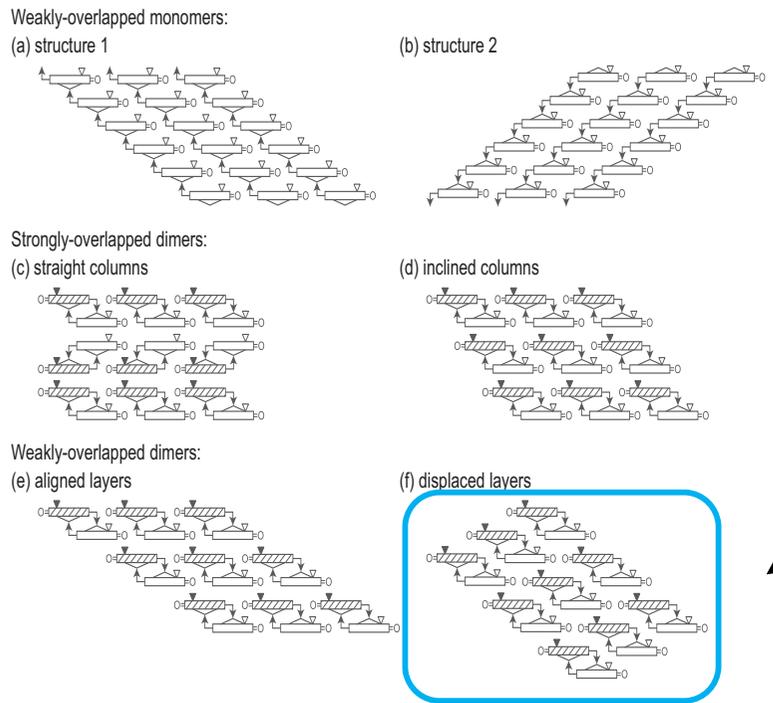
試料: 葉緑素(BChl-c)

葉緑素(BChl-c)の単体分子の構造(枠内図)、および、生体中と同じ状態(分子集合体を形成している)で測定したMg-NMRスペクトル。単体分子では4配位しかないが、分子集合体では5配位と6配位が共存していることが分かった。



事例:
930MHz固体NMRによる葉緑素分子集合体の構造解明

概要:
色素増感太陽電池の候補物質の一つである葉緑素(BChl-c)の分子集合体の構造を解明するために、葉緑素のMg-NMR測定を行った



分子集合体の構造は6種類のモデルが提案されていたが、正解が未決着だった。Mg-NMRの結果から青枠で示した構造モデルだけが正しいことが実証され、**30年以上の論争に終止符が打たれた。**

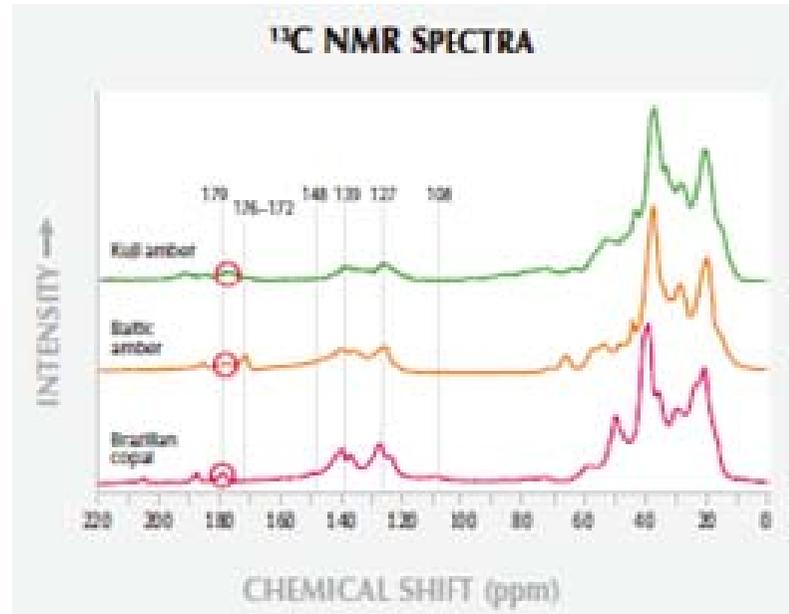


強磁場ステーション

930MHz固体高分解能NMRシステム

桜

試料:天然琥珀、人口琥珀



^{13}C NMRスペクトルの170-200ppmの官能基グループ領域では、人工琥珀に179ppm位に新たなシグナルが観測された。このシグナルを観測することで、天然のエージングと人工のエージングを判別することができる可能性があるといえる。

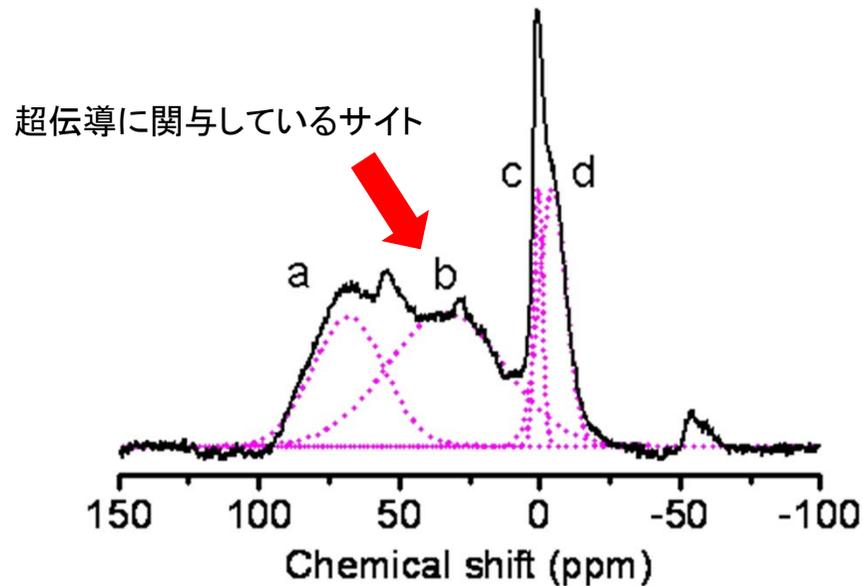
事例:
固体NMRによる天然琥珀と人工琥珀の識別

概要:
天然琥珀と人工琥珀を科学的に識別する方法を開発し、その分子レベルでの構造上の相違点などを化学の立場から客観的に調査する

上から順に、岩手県奥久慈産の琥珀、ポーランド産のバルチックコパール(左の黄色)とそれを加工した人工琥珀、ブラジル産コパールとそれを加工した人工琥珀



試料: ホウ素を添加したダイヤモンド



ホウ素には4種類の異なるサイトがあることが分かりました(図中のa、b、c、d)。詳しい測定の結果、4種類のサイトのうち超伝導に関与しているのは1種類(図中のbサイト)だけで、その他は超伝導でも金属相でもない不純物相であることが分かりました。

事例:
四極子核NMRの観測(ホウ素)

概要:
ダイヤモンドにホウ素を添加すると超伝導になることが発見されたが、X線や電子顕微鏡では構造解析が困難だった。しかし、NMR測定により、詳しい構造が分かった

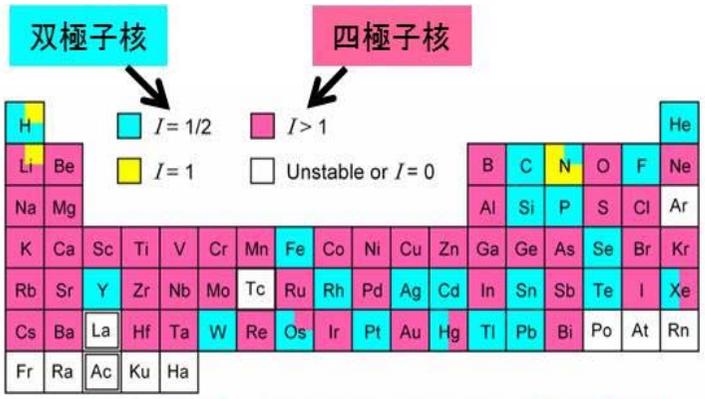


強磁場ステーション

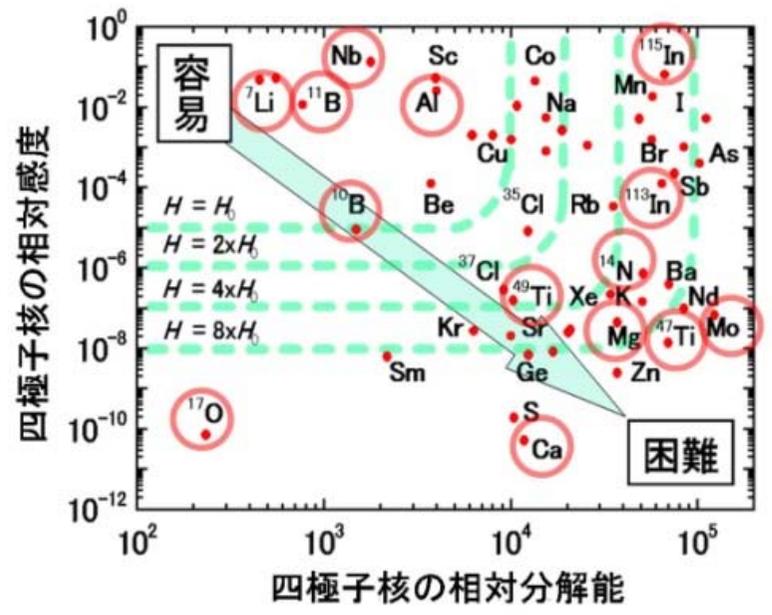
930MHz固体高分解能NMRシステム

桜

試料: Ca、Mg、Ti、Mo等



La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr



双極子核(青色)の感度と分解能は磁場に比例します。
 四極子核(赤色と黄色)の感度と分解能は磁場の2~5乗で向上します。高分解能を得るには20T以上の磁場が必要なので、従来のNMR(磁場は10T前後)では分析対象になりませんでした。

観測難易度を表すグラフ。図中の等高線は、難易度の高い元素(図中の右下)を分析するには、より強い磁場が必要になる様子を表しています。赤丸は、930MHz-NMR装置(磁場強度21.8T)を使ってこの5年間で観測に成功した四極子核。

事例:
 Ca、Mg、Ti、Mo等の高分解能測定

概要:
 分解能が極端に低い、四極子核のCa、Mg、Ti、Mo等の高分解能測定に世界で初めて成功した

