

FPGA 集積型 NMR 分光計 (OPENCORE NMR Spectrometer) の開発

OPENCORE NMR Spectrometer: Open-source core modules for implementing an integrated FPGA-based NMR spectrometer

武田和行

京都大学大学院理学研究科

Kazuyuki Takeda

Graduate School of Science, Kyoto University

One possible design of a home-built NMR spectrometer is presented, in which a Field-Programmable Gate-Array (FPGA) is fully exploited. An FPGA is an LSI composed of a large number of programmable logic gates, in which digital circuits called the "core modules" can be built by writing hardware description codes. In principle, an FPGA can realize any digital circuits within limitations set by the available number of logic elements and the operation speed. In this work, a single FPGA chip is let do all the digital jobs required for an NMR spectrometer. It is shown that a handy and operational three-channel NMR spectrometer can be built by combining the core modules for the digital NMR spectrometer with non-digital peripheral components. These core modules as well as circuit diagrams, board designs, etc., are freely available on <http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/bun/indiv/takezo/opencorenmr/index.html>. By letting these information open to public, I encourage the potential users not only to utilize this spectrometer, referred to as the OPENCORE NMR spectrometer (after the "open" "core" modules), but also to modify it so as to meet their own needs. A home-built spectrometer serves a complementary role to the sophisticated commercial spectrometer when one needs to modify the hardware inside the spectrometer in order to put new ideas into practice. Let us promote new and exciting NMR works!

1. はじめに

少し？昔を思い起こすと、実験機器の制御のための電子回路を組み上げるときには14ピンとか16ピンのロジックICをたくさんユニバーサル基板上に並べて、手作業でハンダ付けしていたものです。基板の裏側は膨大な配線が絡みあってスパゲティ状態それでも装置が思い通りに働いてくれたときは、楽しい思いをしたものです。動かないときは配線間違い（あるいは設計上の不具合）を探すのが大変でしたが……。それが最近（ここ数年）、大規模な設備の導入をしなくても、膨大な規模のデジタル回路を後述のFPGAと呼ばれる半導体デバイス内に実現することが可能になってきましたつまり、個人レベルで自前のLSIを作ることが出来る時代になったのです！独自の研究を行う際には自ら実験機器を製作することが必要になる時もあります。筆者自身、FPGAを試しに試してみてその威力に感銘を受けました。そして筆者の研究上の関心が、「固体NMRのハードウェア・手法を発展させて今まで不可能だった分析を可能にし、科学の発展に貢献する」ことにあったこともあり、FPGAという新しいデバイスをフル活用して新タイプのNMR分光計を自作することに決めました。それが今から3～4年前のことです。

2. FPGAとFPGA集約型NMR分光計 — OPENCORE NMR Spectrometer —

FPGAとは、Field-Programmable Gate-Arrayと呼ばれるデバイスの頭文字をとった略称です。FPGAは、数多くのプログラム可能なロジックゲートが詰まったLSIであり、その内部配線をハードウェア記述言語によって記述することができます。図1にFPGAの写真と開発のイメージ図を示します。FPGAの特徴は以下のとおり：

- 完成した回路のコードは、何度でも利用可能
- FPGA内に構築した複数の回路は、同時に働く
- FPGA内の回路構成は何度でも書き換えることが出来る
- パソコンと書き込みケーブルさえあれば、FPGAの開発が可能

原理上FPGAには、動作速度と回路規模の制約の範囲内であれば、どんなデジタル回路でも組み込むことが出来ます。逆に言えばアナログ回路は組み込めず（つまりアナログ回路が必要なときには周辺機器としてFPGA外に用意する必要があります）。FPGA内に構築されたデジタル回路は、“IP-Core”あるいは“Core module”と呼ばれています。

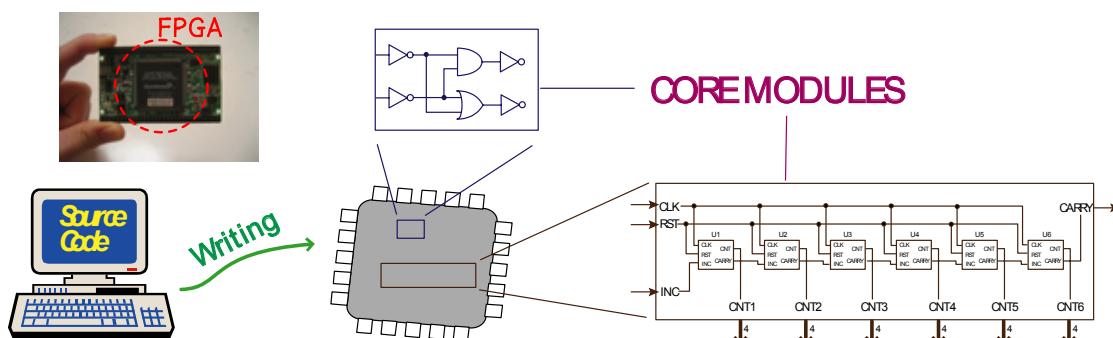


図1. (左上写真) FPGAの例. コンピュータ上でハードウェア記述言語を用いてデジタル回路を記述し、専用のケーブルを用いて「ハードウェア」をFPGA内に構築することができる。FPGA内に組み込まれた個々の回路モジュールはCore moduleと呼ばれている。

ここで筆者は、以下の方針のもとにNMR分光計を設計・製作しました：

- (1) NMR分光計に必要な全てのデジタル信号処理を1チップFPGAに実行させる
- (2) 3つのラジオ波送信チャンネルを実装する
- (3) それぞれのラジオ波送信チャンネルの周波数の上限400 MHzとする
- (4) 振幅変調・位相変調・周波数変調を可能とする

NMR分光計の機能の多くをCore moduleとしてFPGA内に集約させることで、対応する回路の基板設計や部品実装が不要になります。さらにハードウェアの設計を改定する際にも、Core moduleを書き換えるだけで済むため、開発の労力を減らすことになります。さらに、筆者が開発したFPGA集約型NMR分光計のCore moduleのソースコードはWeb上で公開されており[3]、自由にダウンロードして利用することができます。「NMR分光計のCore moduleをOpenにしている」ことにちなんで、このFPGA集約型NMR分光計を“OPENCORE NMR Spectrometer”と名付けました。もちろん、原理上FPGA内に組み込むことが出来ない周波数ミキサー・増幅器・高周波フィルタ等のアナログ回路やDA/AD変換器等の回路もNMR分光計に必要であり、これらは別途回路基板を設計・製作しました。当然ながら？開発は失

敗の連続であり,山ほどガラクタ基板を作ることになりました(図2). OPENCORE NMR SpectrometerのWebサイト[3]には, 回路図や基板パターンのCADデータ・部品リスト等、分光計を構築するのに必要な情報がアップされています.



図2. 失敗作の山.

3. OPENCORE NMR Spectrometerの外観

図3(a)に, OPENCORE NMR Spectrometerの外観を示します. 中心にNMR用のCore Moduleを実装したFPGAを, そのまわりを取り囲むように周辺回路を配置してあります. これら周辺回路を制御するためのデジタル論理信号がFPGAから発信されているため, FPGAを中心に配置することで配線長を最小限にしています. また使いながらハードウェアの調整・改造を行うやすくするために, 回路基板は重ねずに平面上に配置してあります.

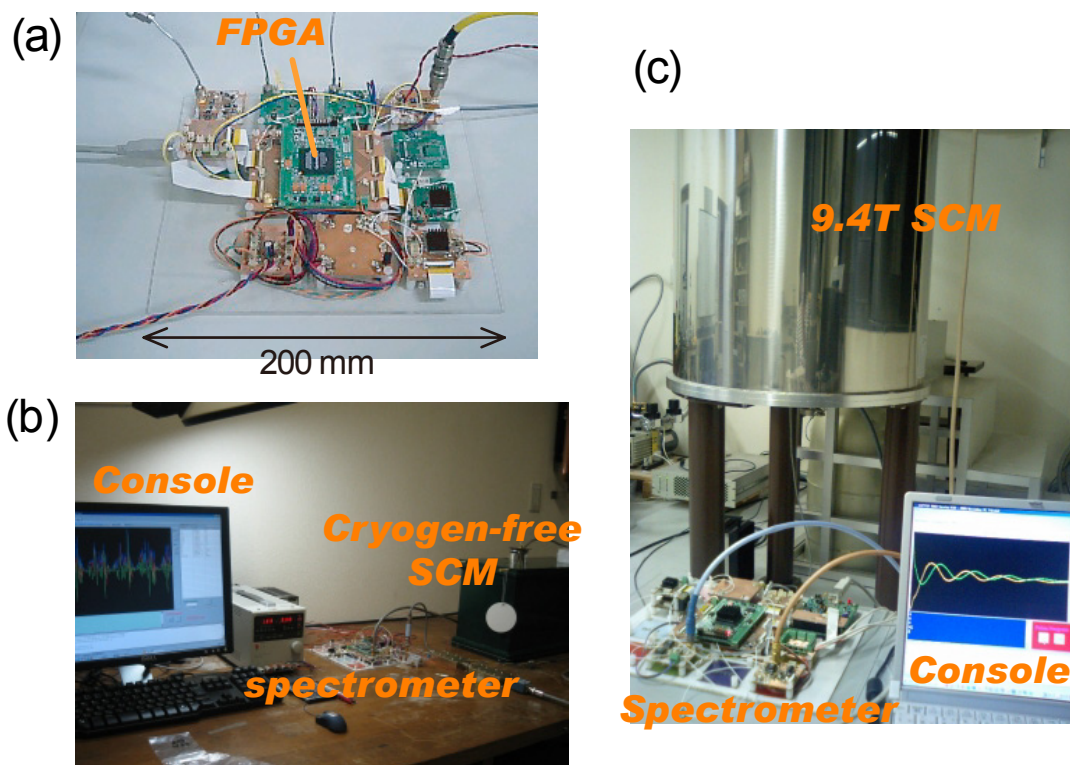


図3. (a) OPENCORE NMR Spectrometer の外観. (b) 磁場可変無冷媒超伝導電磁石(Cryogen-free SCM)を用いた使用例. (c) 9.4 T 超伝導電磁石(SCM)を用いたNMR システム. 制御指令およびNMR 信号データの転送にはUSB を用いている. コンピュータディスプレイには, 独自に開発した OPENCORE NMR 測定ソフトウェアのコンソール画面が映っている.

4. OPENCORE NMR Spectrometerを用いた固体NMR分析

NMRは, 物質に内在する原子核スピンを介して分子の静的動的構造を抽出することのできる強力な分析手段で, 長年にわたって原子核スピンのダイナミクスを巧妙に制御する様々なNMRの実験シーケンスが考案されてきています. これらの実験を行うためには, 測定試料中の核スピンに対して複

雑な変調を施したラジオ波の照射を行うことが分光計に要求されます。OPENCORE NMR Spectrometerが実際に使いものになることを示すために、以下に固体試料のNMR実験の例を挙げます。

固体NMRでは、炭素¹³C等のいわゆる「低感度」な原子核スピンがつくる磁化を増強させて測定感度を向上させるために、交差分極(Cross Polarization: CP)という手法が標準的に用いられています。CP法には様々なバリエーションがあり、たとえば核スピンへの照射周波数を掃引することにより、その効率を向上させて感度をさらに上げることが出来ます[4][5]。図4はこの手法をL-アラニンの粉末試料に適用してOPENCORE NMR Spectrometerで測定した¹³C NMRスペクトルです。図4(b)と(c)に示してあるように、周波数掃引を導入することで信号が増強されています。

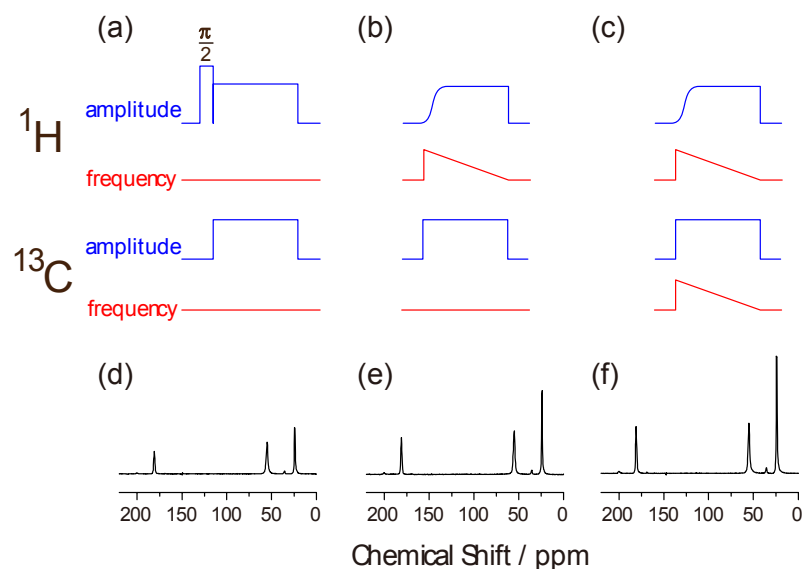


図4. (a) 従来型の¹H-¹³C Cross Polarization (CP)パルスシーケンス. (b) ¹H送信チャンネルに周波数掃引を導入した改良版CPシーケンス[4]. (c) ¹H, ¹³C両方の送信チャンネルに同時に周波数掃引を行うシーケンス[5]. (a)-(c)のシーケンスをOPENCORE NMR Spectrometerで実行して得られた粉末L-アラニンの¹³C NMRスペクトルがそれぞれ(d)-(e)に対応している. L-アラニンには磁氣的に非等価な炭素原子サイトが3種類あるため、3つの共鳴線が表れている. 測定磁場は7 Tで、¹Hおよび¹³Cの共鳴周波数は300 MHzと75 MHz. ~1 msの間に周波数を100~200 kHz連続的に掃引している.

次の例では、照射ラジオ波の周波数・位相を急峻にジャンプさせることで、¹H-¹Hスピン間に働く磁気双極子相互作用を巧みに消去して固体高分解能¹H NMRを実現するFSLG-CRAMPS[6]と呼ばれる実験を示します(図5)。図5(b)は粉末L-アラニンのプロトン2次元NMRスペクトルで、等高線プロットの横方向の射影が「通常」のNMRスペクトル、縦方向の射影が高分解能スペクトルに対応します(縦軸と横軸でスケールが10倍違うことに注意)。このシーケンスによって¹H-¹H間の双極子相互作用が消失して、磁氣的に非等価な3種の¹Hスピンの化学シフトの違いを見分けることができるようになります。

また、OPENCORE NMR Spectrometerには3つのラジオ波送信チャンネルが備わっており、1台で三重共鳴NMR実験が可能です。図6は炭素原子を¹³C、窒素原子を¹⁵Nに同位体置換したL-アラニンで行った¹H-¹³C-¹⁵N三重共鳴実験の例で、¹⁵N核と¹³C核の双極子相互作用による共鳴線の構造を解析することで核スピン間すなわち原子間の距離を求めることができます。またOPENCORE NMR Spectrometerには

外部機器と同期をとる仕組みが備わっていて、ラジオ波送信チャンネルが3種以上に必要となる場合には複数のOPENCORE NMR Spectrometerを同期させて並列動作させることで最大3×台数分の送信チャンネルが得られるようになっています。

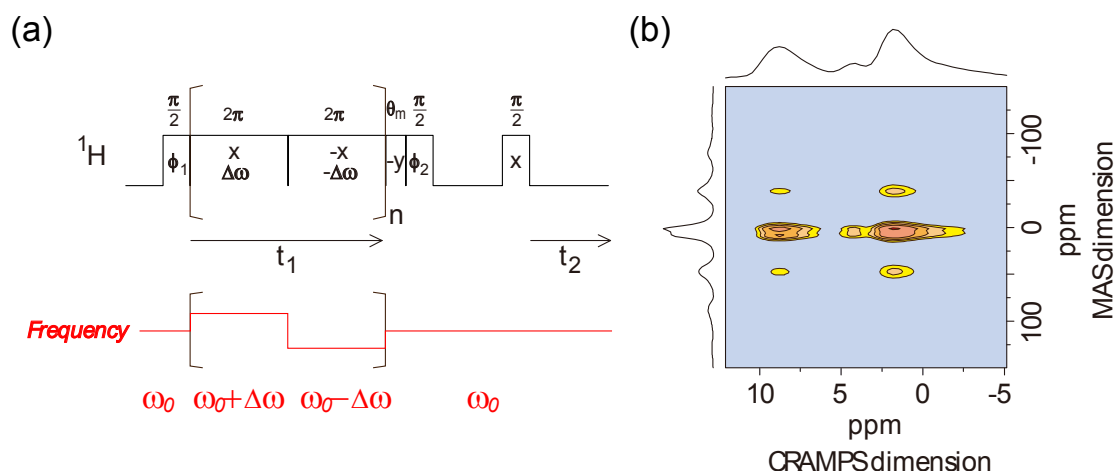


図5. (a) FSLG-CRAMPS実験[6]のパルスシーケンス. ^1H - ^1H スピン間の双極子相互作用を消去して固体 ^1H 高分解能NMRスペクトルを得るために、照射ラジオ波に周波数ジャンプと位相ジャンプを繰り返し用いている. (b) 粉末L-アラニンの ^1H FSLG-CRAMPSスペクトル.

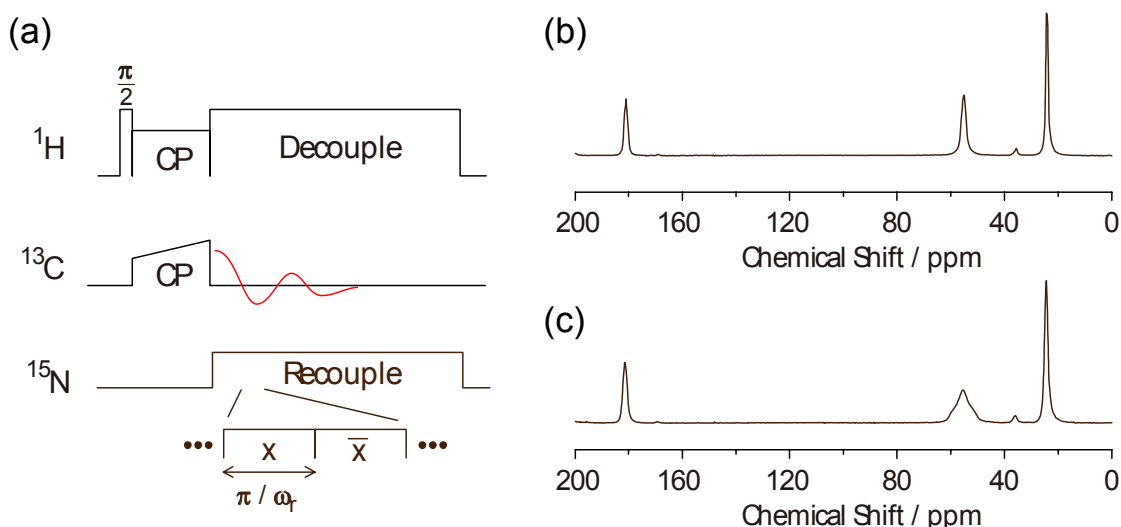


図6. (a) 粉末試料中の ^{13}C - ^{15}N 原子間距離を測定するためのシーケンス. マジック角試料回転 (Magic Angle Spinning: MAS)により異方的相互作用 (化学シフト相互作用および双極子相互作用) を消失させた状態で、試料回転に同期したラジオ波を ^{15}N 核に照射することにより ^{13}C - ^{15}N 核間の双極子相互作用がスペクトルに現われてくる. (b) は ^{13}C , ^{15}N -同位体置換L-アラニンの粉末試料の ^{13}C MASスペクトルで、 ^{15}N 核に照射を行うと(c)のように、 ^{15}N 核近傍の ^{13}C 共鳴線に変化が現れる. 共鳴線の形を解析すると核間距離が得られる.

5. まとめ — 何を目標しているのか? —

NMR分光計は市販されています。購入することができるのにわざわざNMR分光計を自作する意味があるのか?といわれれば、答えは「ある!」です。NMR分光法は20世紀半ばに誕生して以来、強力な分析手段として驚異的な発展を遂げてきただけでなく、現在もなおNMRの研究開発の最前線では新

しいハードウェアと測定手法が次々と産み出され、従来不可能であった分析を可能にする研究が次々と報告されています。未来のスタンダードとなる新しいNMR分析手法の確立を目標の一つとしている筆者（および国内外のNMRの専門家たち）にとって、新しい実験アイデアを実行に移すためには、動作原理がオープンでかつ自由に改造が出来るハードウェアが必須であり、この点においてOPENCORE NMR Spectrometerはブラックボックスの要素が濃い市販品と一線を画しているといえます（もちろん市販品の性能は抜群ですが）。また筆者はデザインをオープンにすることで、ユーザーが単に利用するだけではなく、ユーザーに自身の研究上のニーズに応じて自由にデザインを改造してもらうことも意図しています。Webサイト[3]の情報を活用した新しい研究が推進されることを願っています。

2008年8月現在、OPENCORE NMR Spectrometerは筆者の所属する研究室で3台、また大阪大学大学院基礎工学研究科・量子情報デバイス研究室においても3台、そしてスイス・チューリッヒ工科大学の固体NMRグループで1台稼働しており、NMR分光学の新展開を目指したそれぞれ独自の研究を推進するのに一役買っています。

参 考 文 献

- [1] K. Takeda, OPENCORE NMR: Open-source core modules for implementing an integrated FPGA-based NMR spectrometer, Journal of Magnetic Resonance, 192, 218, 2008.
- [2] K. Takeda, A highly integrated FPGA-based nuclear magnetic resonance spectrometer, Review of Scientific Instruments, 78, 033103, 2007.
- [3] <http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/bun/indiv/takezo/opencorenmr/index.html>
- [4] W.K. Peng, K. Takeda, M. Kitagawa, A new technique for cross polarization in solid-state NMR compatible with high spinning frequencies and high magnetic fields, Chemical Physics Letters, 417, 58, 2006.
- [5] W.K. Peng, K. Takeda, Efficient cross polarization with simultaneous adiabatic frequency sweep on the source and target channels, Journal of Magnetic Resonance, 188, 267, 2007.
- [6] A. Lesage, L. Duma, D. Sakellariou, L. Emsley, Improved resolution in proton NMR spectroscopy of powdered solids, Journal of the American Chemical Society, 123, 5747, 2001.

著者略歴



- 1997～2000 京都大学大学院理学研究科化学専攻博士課程
- 2000～2004 科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業（CREST）
研究員
- 2004～2007 大阪大学大学院基礎工学研究科 助手
- 2007～ 京都大学大学院理学研究科化学専攻 講師
大阪大学大学院基礎工学研究科 招へい教員