

マテリアル先端リサーチインフラ利用報告書

ARIM User's Report

[Release : 2026.02.12] [Update : 2026.02.12]

課題データ / Project Data

| | |
|---|--|
| 課題番号 Project Issue Number | 23NM0140 |
| 利用課題名 Title | ゼオライト構造内AIの構造解析 |
| 利用した実施機関 Support Institute | 物質・材料研究機構 / NIMS |
| 機関外・機関内の利用 External or Internal Use | 外部利用/External Use |
| ARIM半導体基盤PF 関連課題 Related to ARIM-SETI | 指定なし / No Designation |
| 横断技術領域 Cross-Technology Area | 計測・分析/Advanced Characterization |
| 重要技術領域 Important Technology Area | 革新的なエネルギー変換を可能とするマテリアル/Materials enabling innovative energy conversion 次世代ナノスケールマテリアル/Next-generation nanoscale materials |
| キーワード Keywords | 触媒, ナノ粒子/ Nanoparticles, ナノ多孔体/ Nanoporous material, メソポーラス材料/ Mesoporous material |

利用者と利用形態 / User and Support Type

| | |
|---|----------------------------|
| 利用者名 (課題申請者) User Name (Project Applicant) | 後藤 秀和 |
| 所属名 Affiliation | 東京工業大学 物質理工学院応用化学系 |
| 共同利用者氏名 Names of Collaborators Excluding Supporters in the Hub and Spoke Institutes | 多湖輝興, 奥下慶子 |
| ARIM実施機関支援担当者 Names of Supporters in the Hub and Spoke Institutes | 大木忍, 出口健三 |
| 利用形態 Support Type | 機器利用/Equipment Utilization |

利用した主な設備 / Equipment Used in This Project

| | |
|---------------------------------|---|
| 利用した主な設備 Equipment ID & Name | NM-102 : 500MHz固体高分解能NMRシステム NM-103 : 800MHzナローボア固体高分解能NMRシステム |
|---------------------------------|---|

報告書データ / Report

| | |
|--|--|
| 概要 (目的・用途・実施内容) Abstract (Aim, Use Applications and Contents) | 炭化水素生成に関わるゼオライト触媒寿命の向上にはゼオライトの外表面積を拡張した、階層構造ゼオライトが重要視されている。階層構造ゼオライトは各種の有機物の添加によってのみ合成される。多湖研究室では、有機物の添加に代わりAIの添加により階層構造ゼオライトを得ることに成功した。AIが階層構造化に寄与していることが合成実験により確認されたため、AI添加による階層構造化のメカニズムを把握する必要がある。また、AIの状態を正確に把握することで、応用先となる触媒反応の考察が可能になる。そのため、本課題ではAIの状態を評価することを目的とし、AINMRで骨格内/外のAIを判別し、27AIMQ-NMRによりAI環境を評価し、27Al-1H HETCOR NMRにより、AI近傍に必ず存在するHとの関係から状態の違いを判別することが可能であると想定し、本手法の適用を検討した。 |
| 実験 Experimental | JEOL ECZ800 WB 27Al NMR : MAS = 20 kHz, 30° pulse 27AIMQMAS NMR : excitation pulse = 3.75 μs, 3Q-1Q conversion pulse = 1.25 μs. relaxation delay = 2 s, MAS = 20 kHz 27Al-1H HETCOR NMR : MAS = 20 kHz, recycle delay = 3.2 s, scan = 1100 |
| 結果と考察 Results and Discussion | 27Al-NMRにより、すべてのAIがゼオライト骨格に原子として存在することを確認できた。一方で27AIMQ-NMRの結果から階層構造化したゼオライトはAIの状態分布が広いことが明らかとなった。プローブ分子を吸着し、外表面のAIのみにピリジン分子を吸着したところ、27AIMQ-NMRから確認されるAIの分布が少なくなったことから、外表面のAIが広い状態分布を有していることが明らかとなった。27Al-1H HETCOR NMRの結果から、広い状態分布は近接1Hが関与していると考えられた。以上のことから、ゼオライトの構造を制御しているAIの状態を評価でき、本手法により階層構造ゼオライト中のAIの状態評価に適用可能と結論できた。今後は階層構造ゼオライトの後処理・修飾によるAIの状態評価、および触媒活性とAIの状態との相関を明らかにするため、本手法でAIの評価を行う予定である。 |
| 図・表・数式 Figures, Tables and Equations | |
| その他・特記事項 (参考文献・謝辞等) Remarks (References and Acknowledgements) | |

成果発表・成果利用 / Publication and Patents

| | |
|--|--|
| DOI (論文・プロシーディング) DOI (Publication and Proceedings) | |
| 口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[1] Oral Presentations etc. | hidekazu goto "OSDA Free synthesis of Hierarchical MFI" International Symposium on Porous Materials 2023, Poster session on Nov. 23 (Thu.) |
| 口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[2] Oral Presentations etc. | 鉄-ゼオライト触媒物性のエタン脱水素反応への影響 触媒討論会予稿集(CD-ROM) 132nd 2023年 2023年09月06日 後藤秀和, 木村健太郎, 多湖輝興 |
| 口頭発表、ポスター発表 および、その他の論文[3] Oral Presentations etc. | ZMPC 2024, 2024.7.4 Hidekazu Goto, Kentaro Kimura, Teruoki Tago |
| 特許出願件数 Number of Patent Applications | 0件 |

| | |
|--|----|
| 特許登録件数 Number of Registered Patents | 0件 |
|--|----|