

# 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 : 2025.06.10] [Update : 2025.04.21]

### 課題データ / Project Data

課題番号 Project Issue Number	24AT5002
利用課題名 Title	新規核種の固体NMR測定
利用した実施機関 Support Institute	産業技術総合研究所 / AIST
機関外・機関内の利用 External or Internal Use	内部利用 (ARIM事業参画者) / Internal Use (by ARIM members)
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 物質・材料合成プロセス/Molecule & Material Synthesis
重要技術領域 Important Technology Area	量子・電子制御により革新的な機能を発現するマテリアル/Materials using quantum and electronic control to perform innovative functions
キーワード Keywords	核磁気共鳴/ Nuclear magnetic resonance, スピン制御/ Spin control, 核磁気共鳴/ Nuclear magnetic resonance

### 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)	服部 峰之
所属名 Affiliation	産業技術総合研究所物質計測標準研究部門
共同利用者氏名 Names of Collaborators Excluding Supporters in the Hub and Spoke Institutes	
ARIM実施機関支援担当者 Names of Supporters in the Hub and Spoke Institutes	服部峰之, 大沼恵美子
利用形態 Support Type	技術補助/Technical Assistance

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

利用した主な設備 Equipment ID & Name	AT-505 : 固体NMR装置 (SSNMR)
---------------------------------	--------------------------

## 報告書データ / Report

<b>概要（目的・用途・実施内容）</b> <b>Abstract (Aim, Use Applications and Contents)</b>	<p>共鳴周波数が低いなどで測定が難しかった核種のうち、高磁場の装置が導入されたことにより、測定が容易になった核種がある。これらの新規核種について、代表的な含有化合物の固体NMRスペクトルを測定し、これらの測定結果から、化学シフトの基準として適した参照用試料の選定を行うことができる。<sup>1</sup>Hの共鳴周波数200MHz、400MHzのNMR装置を使用して測定した、固体NMRスペクトルについては、産総研が開発した「固体NMRスペクトルデータベース」にて、公開されている。産総研の600MHzの固体NMR装置を利用して測定したスペクトルデータについては、試料管径が1.3mmまで小型化したことにより、67kHzまでのMAS回転数に対応が可能となっている。</p>
<b>実験</b> <b>Experimental</b>	<p>今回は、<sup>127</sup>Iについて、600MHz装置で2.5mm試料管を採用して35kHzまでのMAS回転数のスペクトルを新たに取得した。<sup>127</sup>Iについては、現行データベースでも、ヨウ化アルカリの塩の掲載にとどまっており、LiI、NaI、KI、RbI、CsI について、測定条件の追加となる。LiIの<sup>7</sup>Li、NaIの<sup>23</sup>Na、RbIの<sup>87</sup>Rb、CsIの<sup>133</sup>Csについても、同条件にて測定できた。また、有機カチオンのテトラメチルアンモニウムヨウ化物、テトラエチルアンモニウムヨウ化物、ジイソプロピルエチルアンモニウムヨウ化物についても<sup>1</sup>H スペクトルの取得を試みた。これらの試料は、試薬メーカーから購入したものである。</p>
<b>結果と考察</b> <b>Results and Discussion</b>	<p>LiI、NaI、KI、RbI、CsI、テトラメチルアンモニウムヨウ化物、テトラエチルアンモニウムヨウ化物については、MAS回転数 0-30kHzでの、<sup>127</sup>Iのスペクトルを取得できた。LiIの<sup>7</sup>Li、NaIの<sup>23</sup>Na、RbIの<sup>87</sup>Rb、CsIの<sup>133</sup>Csについても、同条件にて測定できた。テトラメチルアンモニウムヨウ化物、テトラエチルアンモニウムヨウ化物、ジイソプロピルアンモニウムヨウ化物についても<sup>1</sup>H スペクトルの同条件でのスペクトルを得られた。</p>
<b>図・表・数式</b> <b>Figures, Tables and Equations</b>	
<b>その他・特記事項（参考文献・謝辞等）</b> <b>Remarks(References and Acknowledgements)</b>	

## 成果発表・成果利用 / Publication and Patents

<b>DOI（論文・プロシーディング）</b> <b>DOI (Publication and Proceedings)</b>	
<b>口頭発表、ポスター発表および、その他の論文</b> <b>Oral Presentations etc.</b>	
<b>特許出願件数</b> <b>Number of Patent Applications</b>	0件
<b>特許登録件数</b> <b>Number of Registered Patents</b>	0件