

# 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 : 2025.04.15]

### 課題データ / Project Data

課題番号 Project Issue Number	24AT5011
利用課題名 Title	ジシラン架橋環状マクロサイクルの固体NMR測定による構造情報
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	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 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 マテリアルの高度循環のための技術/Advanced materials recycling technologies
キーワード Keywords	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)	山野井 慶徳
所属名 Affiliation	東京大学大学院理学系研究科化学専攻
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,佐藤景一
利用形態 Support Type	共同研究/Joint Research

### 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>	本研究では、電子的・構造的に興味深い特性を有するチオフェンとSi-Si結合を連結した環状化合物（ジシラン架橋マクロサイクル）に注目し、その固体状態における詳細な構造解析を目的とした。これにより、溶液状態とは異なる固体中での分子配列や分子間相互作用の理解を深め、将来的な光・電子材料としての応用展開を視野に入れた構造-物性相関の基盤情報を得ることを目的とする。
<b>実験</b> <b>Experimental</b>	本研究では、2種類のジシラン架橋マクロサイクルを合成し、それらの固体状態における構造情報を明らかにするため、固体状態での $^{13}\text{C}$ NMR測定を行った。さらに、同一化合物の溶液状態での $^{13}\text{C}$ NMRスペクトルとも比較を行い、状態間の構造差や運動性の違いについて検討した。加えて、単結晶X線構造解析も実施し、分子内の構造情報とNMRスペクトルとの相関を確認した。
<b>結果と考察</b> <b>Results and Discussion</b>	固体状態での $^{13}\text{C}$ NMRスペクトルは溶液状態と比較してピーク幅が広く、分解能が低下する傾向にあったが、単結晶X線構造解析によって得られた分子構造と照合することで、各信号の帰属が可能となった。これにより、固体状態における分子の対称性や運動性の低下、ならびに分子間相互作用の影響を反映したスペクトル変化が明確となった。以上の結果から、溶液状態と固体状態の構造-物性相関について新たな知見を得ることができ、今後の機能性材料設計への指針となる可能性が示唆された。
<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