

2008年6月26日
ナノ基盤領域研究交流会

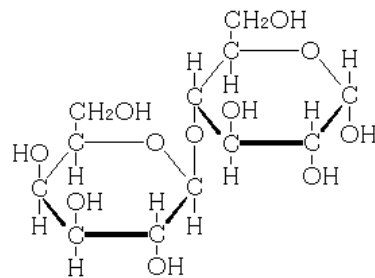
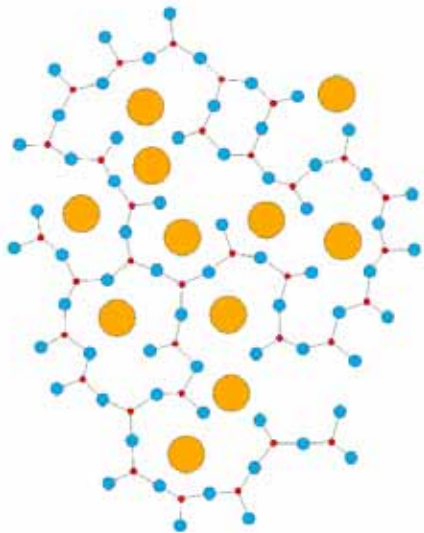
NMRは材料開発にどう役立つのか？

清水 禎
(独)物質・材料研究機構
ナノ計測センター
強磁場NMRグループ長

NMRは他の分析技術と相補的關係

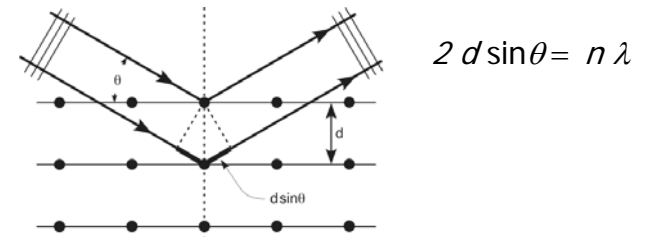
■ NMRの特徴

- 非晶質物質や分子でも化学構造の解析が可能
- 少量の試料でOK(溶液の場合)
- 試料全体を平等に見る
- 群を抜く元素識別能
- 固体は高度な専門知識が必要
- 固体測定には時間がかかる



■ X線、電顕等の特徴

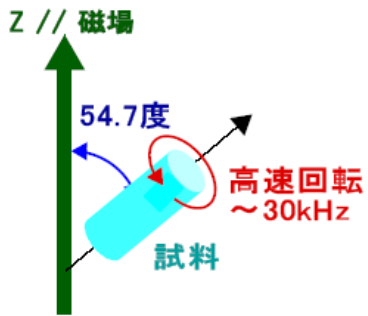
- 隣接する原子番号に不利
- 結晶試料が必要(非晶質に不利)
- 可干渉長よりも微細な構造は不利
- NMRより高感度
- 周期構造に敏感
- 原理も結果も分かり易い



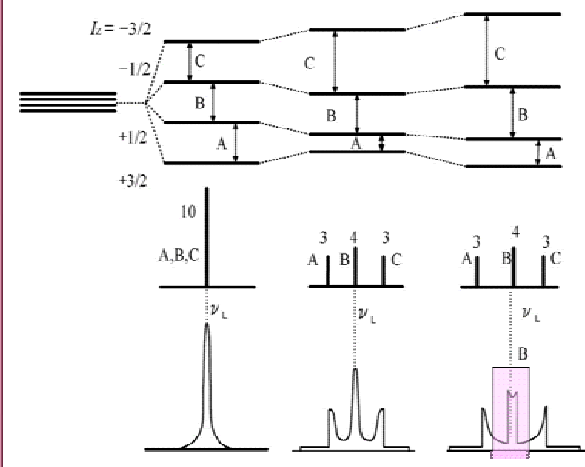
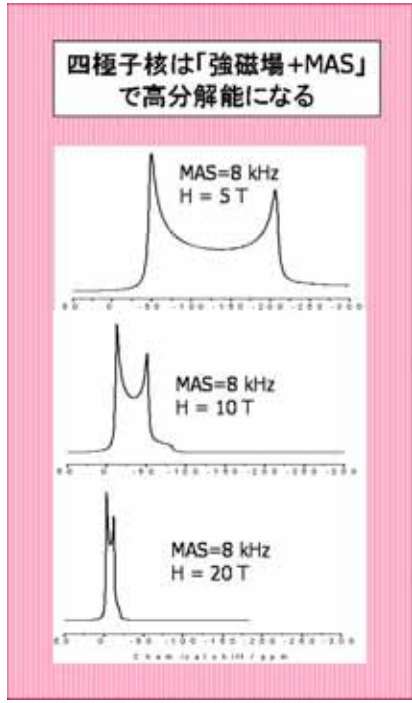
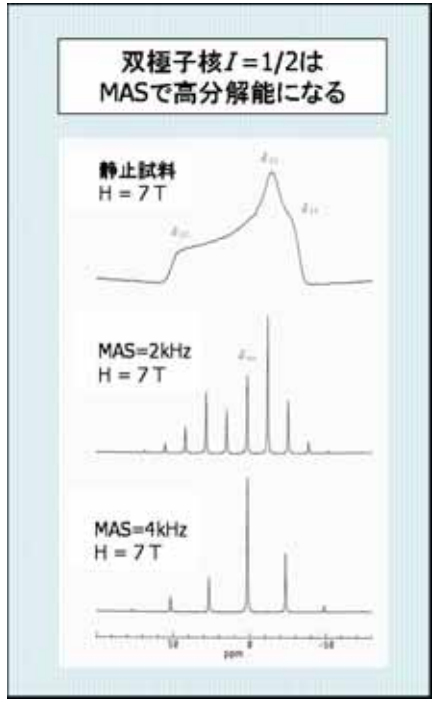
$I \propto Z^2$

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Ku	Ha													
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tm	Yb	Lu					
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

固体NMRに強磁場が必要な理由

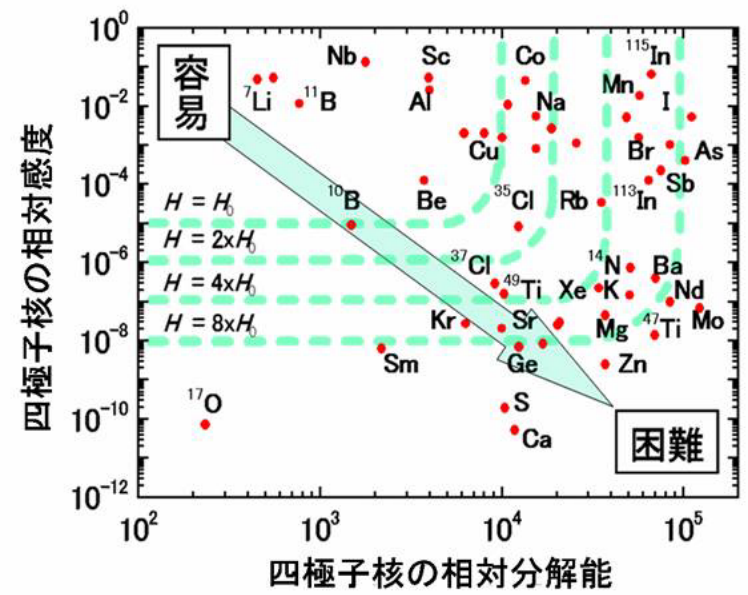


MAS =
Magic Angle Spinning

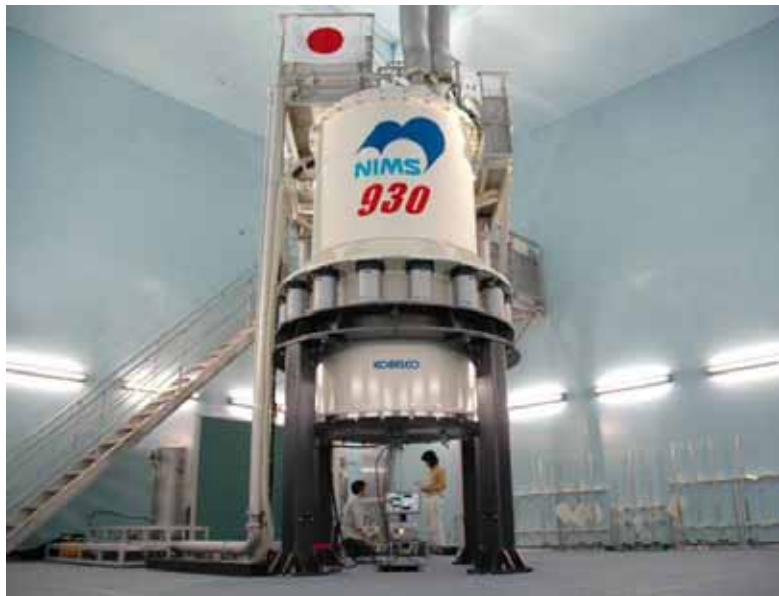


H																				He
Li	Be									B	C	N	O	F	Ne					
Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn			
Fr	Ra	Ac	Ku	Ha																
		La	Ce	Pr	Nd	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				

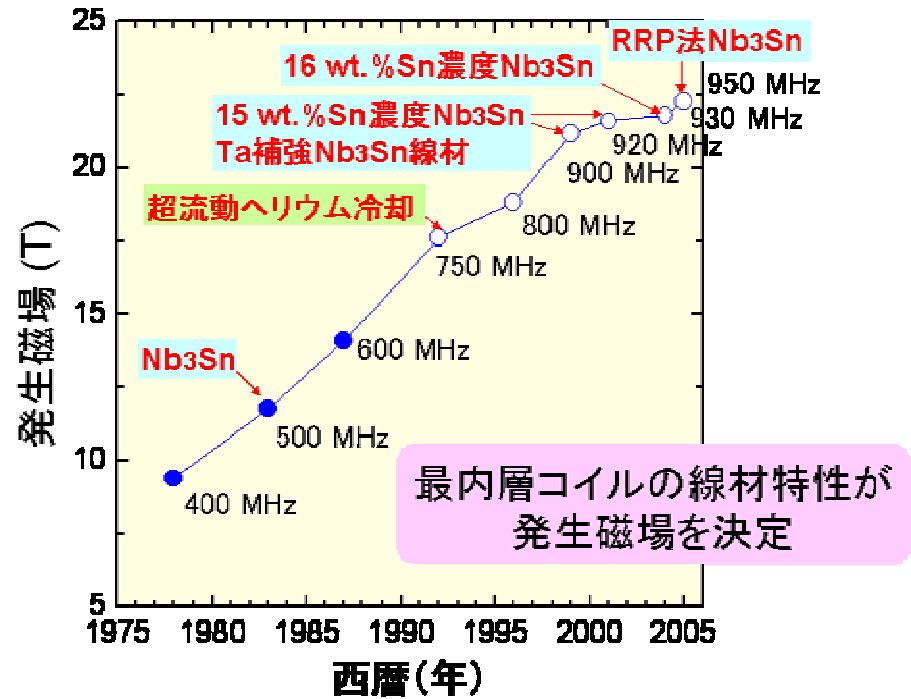
 $I = 1/2$ $I > 1$
 $I = 1$ Unstable or $I = 0$



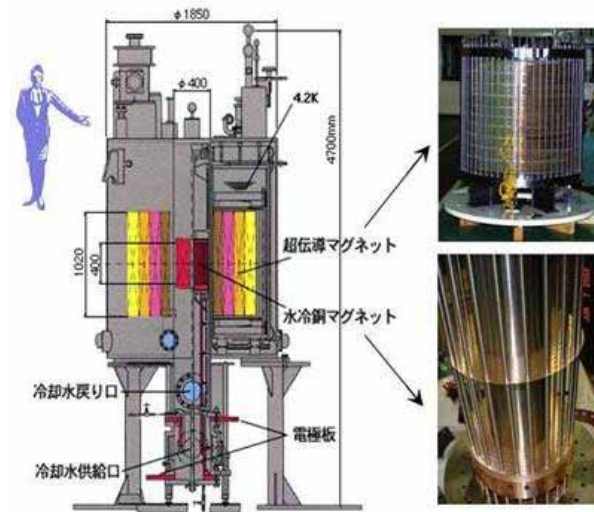
強磁場固体NMRの開発と応用



930MHz(21.8T)NMR磁石



40T級ハイブリッド磁石



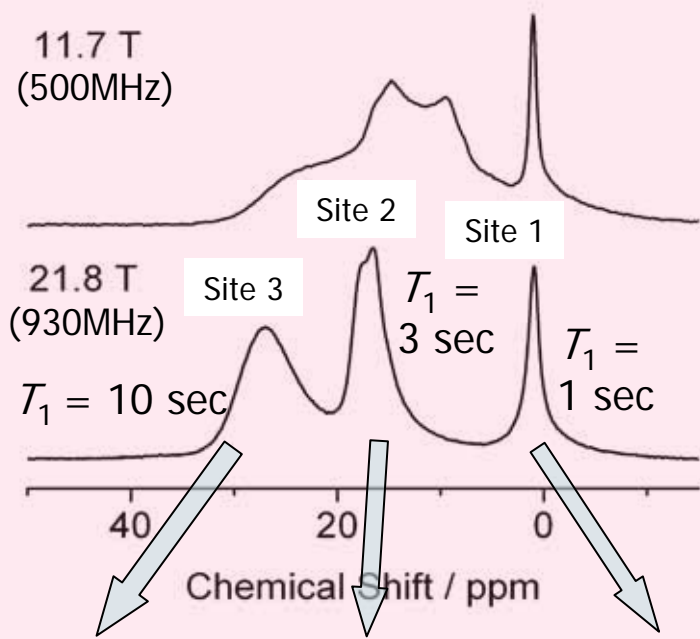
930 MHz 強磁場固体NMRの応用例

H																				He
Li	Be									B	C	N	O	F	Ne					
Na	Mg									Al	Si	P	S	Cl	Ar					
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn			
Fr	Ra	Ac	Ku	Ha																

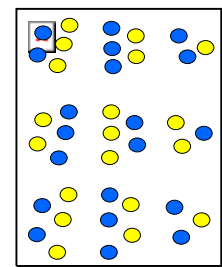
 $I = 1/2$ $I > 1$
 $I = 1$ Unstable or $I = 0$

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

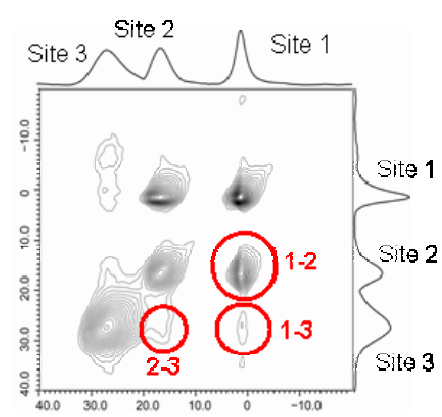
非晶質BCNにおける¹¹B MAS NMR



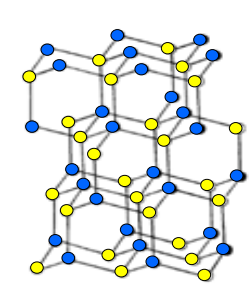
新規の
3配位構造



4配位に結合した
新規の3配位構造



cBN 又は
新規の
4配位構造



・M.Murakami, T.Shimizu, A.Vinu, *et al.*,
Chem. Lett. 35 (2006) 986.
 ・M.Murakami, T.Shimizu, A.Vinu, *et al.*,
Solid State NMR. 31 (2006) 193.

もし hBN なら
 $T_1 = 1000 \text{ sec}$

- 固体で精密分析が可能になる元素の種類
 - 従来は4～6種類程度、20～40Tで約10～20種類の増加。特に四極子核は飛躍的に増加する。
- 強磁場NMRが開拓する新規領域
 - 非晶質材料等の立体構造解明に貢献し、X線や電顕など従来技術と相補的な役割を果たす
 - 具体的には、触媒、石炭、ガラス、製剤、膜タンパクなどの立体構造が解明され、高性能な材料設計、効率的な材料利用方法などを開発する設計指針として貢献する