

# 固体NMRによる局所構造解析



**小笠原 正剛**

准教授 博士（工学）

Masataka Ogasawara

理工学研究科 物質科学専攻 応用化学コース

## 研究キーワード

核磁気共鳴分光装置, 新規機能性材料開発,  
局所構造解析

## 研究概要

核磁気共鳴分光法（NMR）は、基礎研究の分野において $^1\text{H}$ や $^{13}\text{C}$ の分析に広く用いられています。有機化合物を溶液として測定するのが一般的ですが、必要なオプションを備えたNMR分析装置では固体試料の測定が可能です。図1に秋田大学が共通機器として保有する装置と試料管（容積約27  $\mu\text{L}$ ）写真を示します。

無機材料の開発において、固溶体を形成する複合酸化物では、含有金属のイオン半径により結晶格子サイズが変化したり、ある一定温度で結晶化が起こるケースがあります。X線回折法（XRD）は多様な無機材料に対応出来る有用な分析法で、基本的な相同定や構造解析に用いられていますが、当研究室ではXRDとNMRの評価を組み合わせ材料開発を行っております。図2は、Cu-Al-Cr系デラフォサイト型酸化物の還元処理前後のNMRスペクトルです。還元処理によって、デラフォサイト型酸化物には無い4配位のアルミニウムを含む化合物が生成したことがわかりました。また、この他にも機能性無機多孔質材料の開発を目的としてゼオライトの分析を行っております。さらに、無機材料に限らずバイオマス資源や有機高分子化合物の分析についても相談を受け、共同研究として取り組んでいます。

## 予想される応用例

機能性材料の評価において、他の分析では同じに見える場合でも、固体NMRでは差別化できる可能性があります。

## 産業界へのアピールポイント

固体NMRは、非晶質な化合物の構造解析における強力なツールです。また、微細な構造変化を手掛かりとする材料物性の評価・設計への利用が期待されます。



図1 分析装置（左）と  
3.2 mm試料管（右）

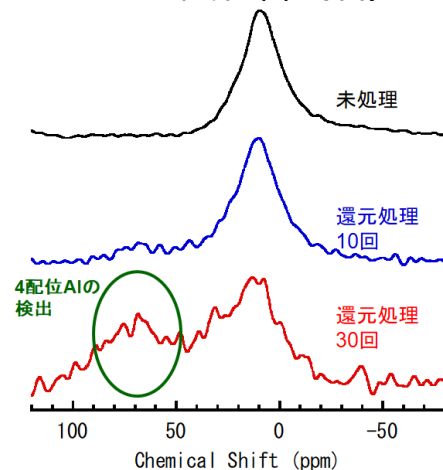


図2 Cu-Al-Cr系複合酸化物の還元処理における局所構造変化