

第 71 回 固体 NMR・材料フォーラム 開催報告書

日時：2023 年 5 月 19 日（金）午前 10:25 ～ 午後 17:05

場所：産総研つくば中央共用講堂 2F 大会議室（講演会）、1F ホワイエ（ポスター会場）、1F 小会議室（運営委員会）

主催：固体 NMR・材料フォーラム

協賛：産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター

協賛：物質・材料研究機構（NIMS）NIMS マテリアル先端リサーチインフラ

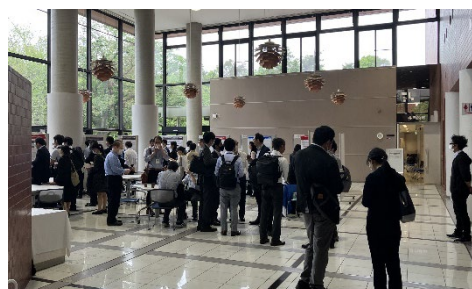
内容：講演 5 件、ポスター発表 9 件（+1 件の企業展示）、DNP-NMR 装置見学、地質標本館見学

参加者数：102 人（内 企業の参加者 46 人）

固体 NMR・材料フォーラムは 1 年に 1 度開催されており、本年度は本フォーラムの運営委員である永島が世話人代表として産総研つくば中央地区にてオンサイト開催しました。開催内容は 5 件の講演、9 件のポスター発表（+1 件の企業展示）、DNP-NMR 装置見学、地質標本館見学（空いた時間に個人見学）です。

講演では、有機微結晶、石炭、セメント・コンクリート、ゼオライト、粘土鉱物の固体 NMR 研究を推進している若手の先生方にご講演いただきました。講演内容には単にそれぞれの材料への固体 NMR の応用だけではなく、最先端の固体 NMR 解析手法についての内容が含まれており、化学シフトの異方性情報を決定する 3 次元拘束磁場下の固体 NMR、 ^{17}O 同位体ラベル法とその高分解能測定、近接共鳴周波数原子核の二次元相関（ ^{13}C - ^{27}Al 、 ^{23}Na - ^{27}Al ）、コンクリート材料への DNP-NMR の適用、DFT 計算と機械学習による化学シフト予測など、これら最先端の検討についての質疑応答も活発に行われました。

ポスター発表では、参加者にコーヒーが提供され、リラックスした雰囲気の中で行われました。産総研内の固体 NMR ユーザー皆様のご協力のもとに大学の固体 NMR 研究者や企業研究者の方との活発な議論が行われておりました。また、試料の前処理に役立つ装置を扱う企業の展示も行われました。普段は NMR 装置メーカーの展示しかないため、参加者、企業展示側共に好評でした。



ポスター発表会場の様子

DNP-NMR 装置見学では、60 名以上が参加しました。アカデミアだけでなく、企業の固体 NMR 解析担当の参加者も多く見学に参加いただきました。見学では様々な質問が出ましたが、装置の構成、装置の安定性、測定における注意点、装置運営、DNP-NMR で可能な解析についての質問が多くありました。

最後に本フォーラムにご参加、ご協力いただきました皆様に感謝いたします。

プログラム (敬称略)

1. 会場挨拶

(10:25-10:30)

(産総研触媒センター) 永島 裕樹

2. 三次元拘束磁場下の固体 NMR

(10:30-11:00)

(森林総研 (FFPRI)) 久住 亮介

3. 固体 NMR による石炭の分子構造解析

(11:10-11:40)

(日本製鉄) 畑 友輝

(昼食) (11:50-12:50) (60分)

4. 見学会 (DNP-NMR 装置、地質標本館)

(12:50-13:40) (50分)

5. ポスター発表

(13:40-15:00) (80分)

6. C-S-H をはじめとしたセメント水和物の分析に基づくセメント設計の在り方

(15:00-15:30)

(新潟大大学院(工学部)) 斎藤 豪

7. 固体高分解能 NMR を通して見るゼオライトの局所構造

(15:40-16:10)

(横浜国立大) 稲垣 怜史

8. DFT-GIPAW 計算と機械学習によるケミカルシフト予測モデルの開発と逆解析による原子構造の決定

(16:20-16:50)

(千葉大学大学院) 大窪 貴洋

9. 次回案内等

(17:00-17:05)