

「固体NMRスペクトルデータベース (SSNMR_SD)」の概要

「固体NMRスペクトルデータベース (SSNMR_SD)」は、主に固体試料の NMR スペクトルを収録したデータベースです。ほとんどのスペクトルが国立研究開発法人産業技術総合研究所（もしくは、その一部の前身である、化学技術研究所および物質工学工業技術研究所）の固体 NMR 関連の研究者グループにて測定されたものです。

1980年代にマジック角回転法による固体高分解能 NMR スペクトルの測定が普及し始め、固体試料でも液体もしくは溶液試料類似のスペクトルが得られるようになりました。これに伴い、固体 NMR 法の応用分野が急速に拡大しました。しかし、固体試料の場合、装置のセットアップをして標準的な試料のスペクトルを最初に測定してから、本測定に入ります。測定対象核種および固体試料にバラエティがあるため、標準的な試料の選択、測定パラメータの選択などに頭を悩ますことがあります。初めて測定する核種もしくは初めて測定する試料の場合、本当に高品質のスペクトルが得られたかどうか、判断に困ることがあります。

本研究所の固体 NMR 関連の研究者グループは、1980年代半ばから固体高分解能 NMR スペクトルの測定を材料研究に役立ててきました。測定したデータの中には、標準的だと思われる試料のデータが多く含まれています。本データベースにおいて標準的だと思われる試料の NMR スペクトルデータを公開することにより、固体 NMR 法がさらに普及し研究開発の進展に貢献することを願っています。

本データベースは2007年4月から構築を開始し、2008年1月に外部公開を始めました。2013年10月に外部公開を停止しましたが、2015年1月から再構築を始め、2016年4月から外部公開を再開しました。

2016年4月1日

林 繁信